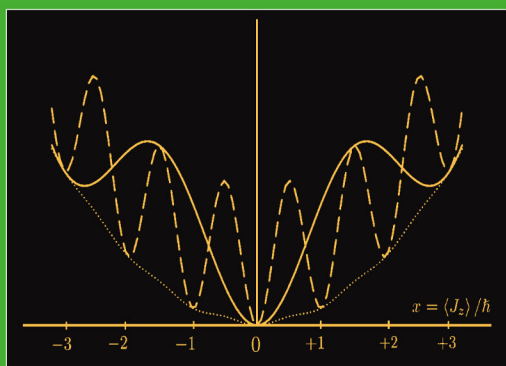


MÉCANIQUE QUANTIQUE – TOME III ●

FERMIONS, BOSONS, PHOTONS,
CORRÉLATIONS ET INTRICATION



●
CLAUDE COHEN-TANNOUJJI
BERNARD DIU
FRANCK LALOË

Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu
et Franck Lalö

Mécanique quantique

Tome III

*Fermions, bosons, photons,
corrélations et intrication*

SAVOIRS ACTUELS

EDP Sciences/CNRS ÉDITIONS

Dans la même collection :

Cohomologie galoisienne - Et théorie du corps de classes

David Harari

Optique non linéaire

François Hache

Chimie verte - Concepts et applications

Jacques Augé et Marie-Christine Scherrmann

De la solution à l'oxyde - Chimie aqueuse des cations métalliques,

Synthèse de nanostructures

Jean-Pierre Jolivet

Physique de la conversion d'énergie

Jean-Marcel Rax

La matière en désordre

Étienne Guyon, Jean-Pierre Hulin et Daniel Bideau

Retrouvez tous nos ouvrages et nos collections sur
<http://laboutique.edpsciences.fr>

Ouvrage publié avec le soutien du laboratoire Kastler Brossel.

Imprimé en France

© 2017, EDP Sciences, 17 avenue du Hoggar, BP 112, Parc d'activités de Courtabœuf, 91944 Les Ulis Cedex A

et

CNRS Éditions, 15, rue Malebranche, 75005 Paris.

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

EDP Sciences, ISBN (papier) : 978-2-7598-2107-5, ISBN (ebook) : 978-2-7598-2151-8

CNRS Éditions, ISBN : 978-2-271-11808-0

Table des matières

XV	Opérateurs de création et d'annihilation pour des particules identiques	1
A	Formalisme général	2
B	Opérateurs symétriques à une particule	14
C	Opérateurs à deux particules	19
	Compléments du chapitre XV	
	GUIDE DE LECTURE	29
A_{XV}	Particules et trous	33
1	Etat fondamental d'un gaz de fermions sans interactions . .	33
2	Nouvelle définition des opérateurs de création et d'annihilation	34
3	Vide d'excitations	35
B_{XV}	Gaz parfait en équilibre thermique ; fonctions de distribution quantiques	37
1	Description grand-canonique d'un système sans interactions	38
2	Valeurs moyennes des opérateurs symétriques à une particule	40
3	Opérateurs à deux particules	44
4	Nombre total de particules	47
5	Equation d'état, pression	52
C_{XV}	Systèmes de bosons condensés, équation de Gross-Pitaevskii	57
1	Notations, ket variationnel	57
2	Une première approche	59
3	Généralisation, calcul en notation de Dirac	62
4	Discussion physique	65
D_{XV}	Équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps	73
1	Evolution temporelle	73
2	Analogie hydrodynamique	80
3	Ecoulements métastables, superfluidité	83
E_{XV}	Systèmes de fermions, approximation de Hartree-Fock	95
1	Les bases de la méthode	96
2	Généralisation : méthode opératorielle	107

F_{XV}	Fermions, Hartree-Fock dépendant du temps	119
1	Ket variationnel et notations	119
2	Méthode variationnelle	120
3	Calcul de l'optimisateur	123
4	Equations du mouvement	125
G_{XV}	Fermions ou bosons : équilibre thermique en champ moyen	129
1	Principe variationnel	130
2	Approximation de l'opérateur densité à l'équilibre	134
3	Equations de champ moyen dépendant de la température .	144
H_{XV}	Applications de la méthode du champ moyen à température non nulle	153
1	Hartree-Fock à température non nulle, bref rappel	153
2	Système homogène	154
3	Magnétisme spontané de fermions répulsifs	157
4	Bosons : équation d'état, instabilité attractive	165
<hr/> <hr/>		
XVI	Opérateur champ	171
A	Définition de l'opérateur champ	172
B	Opérateurs symétriques	175
C	Evolution dans le temps de l'opérateur champ (point de vue de Heisenberg)	184
D	Lien avec la quantification d'un champ	186
Compléments du chapitre XVI		
GUIDE DE LECTURE		189
A_{XVI}	Corrélations spatiales dans un gaz parfait de bosons ou de fermions	191
1	Système dans un état de Fock	191
2	Fermions dans l'état fondamental	194
3	Bosons dans un état de Fock	198
B_{XVI}	Fonctions de corrélation spatio-temporelles, fonctions de Green	203
1	Fonctions de Green dans l'espace ordinaire	203
2	Transformées de Fourier	212
3	Fonction spectrale, règle de somme	218
C_{XVI}	Théorème de Wick	223
1	Démonstration du théorème	223
2	Applications : fonctions de corrélation d'un gaz parfait . .	228
<hr/> <hr/>		

XVII	Etats appariés de particules identiques	235
A	Opérateurs création et annihilation d'une paire de particules	238
B	Construction d'états appariés	242
C	Propriétés des kets caractérisant les paires d'états	247
D	Corrélations entre particules, fonction d'onde de paires . .	255
E	Les états appariés comme vide de quasi-particules ; transformations de Bogolubov-Valatin	261
	Compléments du chapitre XVII	
	GUIDE DE LECTURE	269
A_{XVII}	Opérateur champ de paires de particules identiques	271
1	Opérateurs de création et d'annihilation de paires	272
2	Valeurs moyennes dans un état apparié	277
3	Relations de commutation des opérateurs champ	288
B_{XVII}	Energie moyenne dans un état apparié	295
1	Utilisation d'états qui ne sont pas états propres du nombre total de particules	295
2	Hamiltonien	297
3	Fermions de spin 1/2 dans un état singulet	300
4	Bosons de spin nul	306
C_{XVII}	Appariement de fermions, théorie BCS	315
1	Optimisation de l'énergie	317
2	Fonctions de distribution, corrélations	326
3	Discussion physique	341
4	Etats excités	346
D_{XVII}	Paires de Cooper	355
1	Le modèle de Cooper	355
2	Vecteur d'état et hamiltonien	355
3	Solution de l'équation aux valeurs propres	357
4	Calcul de l'énergie de liaison dans un cas simple	357
E_{XVII}	Bosons répulsifs condensés	361
1	Etat variationnel, énergie	363
2	Optimisation	365
3	Propriétés de l'état fondamental	368
4	Méthode opératorielle de Bogolubov	379

XVIII	Rappels d'électrodynamique classique	385
A	Electrodynamique classique	387
B	Description du champ transverse comme un ensemble d'oscillateurs harmoniques	396
Complément du chapitre XVIII		
GUIDE DE LECTURE		405
A_{XVIII}	Formulation lagrangienne de l'électrodynamique	407
1	Lagrangien avec divers types de variables	408
2	Application au champ de rayonnement libre	414
3	Lagrangien du système global champ + particules en interaction	420
<hr/> <hr/>		
XIX	Quantification du rayonnement électromagnétique	425
A	Quantification du rayonnement en jauge de Coulomb	427
B	Les photons, excitations élémentaires du champ quantique libre	432
C	Description des interactions	437
Compléments du chapitre XIX		
GUIDE DE LECTURE		445
A_{XIX}	Echanges d'impulsion entre atomes et photons	447
1	Recul d'un atome libre absorbant ou émettant un photon .	448
2	Applications de la force de pression de radiation : ralentissement et refroidissement des atomes	453
3	Blocage du recul par un confinement spatial	464
4	Suppression du recul dans certains processus multiphotoniques	469
B_{XIX}	Moment cinétique du rayonnement	473
1	Valeur moyenne du moment cinétique pour une particule de spin 1	474
2	Moment cinétique du rayonnement libre classique en fonction des variables normales	477
3	Discussion physique	480
C_{XIX}	Echanges de moment cinétique entre atomes et photons	485
1	Transfert de moment cinétique de spin aux variables atomiques internes	486
2	Les méthodes optiques	488
3	Transfert de moment cinétique orbital aux variables atomiques externes	495

XX	Absorption, émission, et diffusion de photons par un atome	497
A	Outil de base : l'opérateur d'évolution	498
B	Absorption de photons entre deux niveaux atomiques discrets	503
C	Processus d'émission induite et d'émission spontanée	510
D	Rôle des fonctions de corrélation dans les processus à un photon	514
E	Diffusion de photons par un atome	516
Compléments du chapitre XX		
GUIDE DE LECTURE		527
A_{XX}	Exemple de processus multiphotonique : absorption à deux photons	529
1	Rayonnement monochromatique	529
2	Rayonnement non monochromatique	533
3	Discussion physique	537
B_{XX}	Photo-ionisation	541
1	Brefs rappels sur l'effet photo-électrique	542
2	Calcul des taux de photo-ionisation	544
3	Une théorie quantique du rayonnement est-elle essentielle pour décrire la photo-ionisation ?	550
4	Photo-ionisation à deux photons	556
5	Ionisation tunnel avec des champs laser intenses	559
C_{XX}	Atome à deux niveaux dans un champ monochromatique.	
	Méthode de l'atome habillé	561
1	Brève description de la méthode de l'atome habillé	563
2	Domaine des couplages faibles	569
3	Domaine des couplages forts	574
4	Modifications du champ. Dispersion et absorption	580
D_{XX}	Les déplacements lumineux : un outil pour manipuler les atomes et le champ	585
1	Forces dipolaires et pièges laser	585
2	Miroirs pour atomes	587
3	Réseaux optiques	588
4	Refroidissement sub-Doppler. Effet Sisyphe	589
5	Détection non destructive d'un photon	593
E_{XX}	Détection de paquets d'ondes à un ou deux photons, interférences	597
1	Paquets d'ondes à un photon, probabilité de photo-détection	599
2	Signaux d'interférence à un ou deux photons	602
3	Amplitude d'absorption d'un photon par un atome	608
4	Diffusion d'un paquet d'ondes	610
5	Exemple de paquet d'ondes à deux photons intriqués	615

XXI	Intrication quantique, mesures, inégalités de Bell	623
A	Notion d'intrication, buts de ce chapitre	624
B	Etats intriqués d'un système de deux spins 1/2	626
C	Intrication entre systèmes physiques quelconques	629
D	Mesure idéale et états intriqués	632
E	Expériences "quel chemin" : peut-on identifier le chemin suivi par le photon dans l'expérience des fentes d'Young ? .	639
F	Intrication, non-localité, théorème de Bell	641
Compléments du chapitre XXI		
GUIDE DE LECTURE		651
A_{XXI}	Opérateur densité et corrélations ; séparabilité	653
1	Entropie statistique de von Neumann	653
2	Différences entre corrélations classiques et quantiques . . .	656
3	Séparabilité	659
B_{XXI}	Etats GHZ, échange d'intrication	663
1	Désaccord de signe dans un état GHZ	663
2	Échange d'intrication	668
C_{XXI}	Emergence d'une phase relative sous l'effet de processus de détection	673
1	Probabilités des mesures de position simple, double, etc. .	674
2	Augmentation de l'intrication sous l'effet du processus de détection	679
3	Détection d'un grand nombre de particules Q	681
D_{XXI}	Emergence d'une phase relative sur des condensats à spin, argument EPR et non-localité macroscopiques	689
1	Deux condensats à spin	690
2	Probabilités des différents résultats de mesure	692
3	Discussion	696
<hr/> <hr/>		
APPENDICES		703
IV	Intégrale de chemins de Feynman	703
1	Propagateur quantique d'une particule	704
2	Interprétation en termes d'histoires classiques	708
3	Discussion ; une nouvelle règle de quantification	710
4	Opérateurs	712

V	Multiplicateurs de Lagrange	717
1	Fonction de deux variables	717
2	Fonction de N variables	719
VI	Rappels de mécanique statistique quantique	721
1	Ensembles statistiques	721
2	Variables intensives ou extensives; valeur des grandeurs physiques	729
VII	Transformée de Wigner	735
1	Fonction delta d'un opérateur	737
2	Distribution de Wigner de l'opérateur densité (particule sans spin)	737
3	Transformée de Wigner d'un opérateur	749
4	Généralisations	757
5	Discussion physique, distribution de Wigner et effets quan- tiques	758

BIBLIOGRAPHIE	765
----------------------	------------

INDEX	770
--------------	------------

Avant-propos des éditeurs scientifiques

En tant que directeurs de la collection “ Savoirs Actuels”, nous sommes particulièrement heureux d’y publier l’ouvrage “Mécanique quantique, tome III” par Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu et Franck Laloë. Les deux premiers tomes, publiés en 1973, ont connu un énorme succès dans le monde entier et ont fait l’objet de nombreuses traductions. Ils contiennent un exposé approfondi des principes et des applications de la mécanique quantique qui a servi de base à l’apprentissage du domaine pour des générations d’étudiants dans de nombreuses disciplines. Le tome III qui leur fait suite développe la seconde quantification et la théorie de l’opérateur champ, ainsi que plusieurs de ses applications : méthodes du champ moyen (Hartree-Fock, Gross-Pitaevskii), théorie de l’appariement, etc., puis la quantification du champ électromagnétique (émission spontanée, atome habillé, etc.) ; le dernier chapitre est consacré à divers aspects de l’intrication quantique.

Les trois auteurs sont des physiciens de très grande réputation internationale :

Claude Cohen-Tannoudji a été chercheur CNRS, professeur à l’Université de Paris puis au Collège de France, où il a donné pendant trente années des cours dont le rayonnement a été considérable dans de nombreux laboratoires. Il a été lauréat du Prix Nobel en 1997 avec Steve Chu et William Phillips pour ses nombreuses contributions à la physique atomique et l’optique quantique, en particulier dans le domaine du refroidissement et du piégeage d’atomes par des faisceaux laser.

Bernard Diu a été professeur à l’Université de Paris et y a enseigné avec grand succès diverses disciplines de la physique, en particulier la mécanique quantique ainsi que la mécanique statistique. Son domaine de recherche principal est la physique des particules élémentaires. Il a toujours fait preuve d’un intérêt soutenu pour l’enseignement et la diffusion des sciences, et il a publié plusieurs livres destinés au grand public dont “Traité de physique à l’usage des profanes”.

Franck Laloë a été maître assistant attaché aux cours de mécanique quantique, puis chercheur CNRS au sein du Laboratoire Kastler-Brossel. Ses travaux de recherche ont porté sur divers effets liés aux statistiques quantiques, l’orientation nucléaire de l’hélium trois par pompage optique, les ondes de spin dans les gaz à basse température, et divers aspects de la mécanique quantique fondamentale. Il a également effectué des recherches en acoustique musicale.

Ces auteurs ont déjà publié de nombreux autres ouvrages. Nous tenons à signaler les livres précédemment édités dans “Savoirs Actuels” auxquels ont collaboré ces auteurs :

“Photons et atomes, introduction à l’électrodynamique quantique” (1987, nouvelle édition 2001), par Claude Cohen-Tannoudji, Jacques Dupont-Roc et Gilbert Grynberg, traite en grand détail de la quantification du champ électromagnétique ;

“Processus d’interaction entre photons et atomes” (1988, nouvelle édition 1996), par les mêmes auteurs, décrit les applications à la physique atomique, et détaille en particulier la méthode de l’atome habillé qui est à la base des travaux qui ont valu le prix Nobel à Claude Cohen-Tannoudji ;

“Comprenons-nous vraiment la mécanique quantique ?” (2011, nouvelle édition prévue en 2018) par Franck Laloë a fait date dans les ouvrages consacrés aux fondements de la mécanique quantique ; il est destiné à devenir un “classique”, intéressant aussi bien les physiciens que les philosophes, et au-delà tous ceux qui sont passionnés par la science aujourd’hui.

Michèle Leduc, physicienne, directrice de recherche émérite au CNRS et au Laboratoire Kastler Brossel, directrice de la collection “Savoirs Actuels”

Michel Le Bellac, professeur de physique émérite à l’Université de Nice-Sophia Antipolis, directeur adjoint de la collection “Savoirs Actuels” pour la série Physique et Astrophysique

Avant-propos des auteurs au Tome III

Ce tome III poursuit l'étude de la mécanique quantique présentée dans les tomes I et II [1, 2]. Il introduit de nouvelles approches et méthodes de calcul qui se révèlent essentielles pour décrire et interpréter des phénomènes physiques observés dans de nombreux domaines de la physique, dont certains sont en plein développement.

Un premier sujet étudié est l'étude des ensembles de particules identiques, libres ou en interaction. De tels systèmes ont déjà été décrits dans le Chapitre XIV du tome II en partant du postulat de symétrisation, qui impose à la fonction d'onde du système global de rester invariante par permutation de deux particules (cas des bosons, de spin entier ou nul) ou de changer de signe dans une permutation impaire (cas des fermions, de spin demi-entier). Dans ce tome III, nous introduisons une autre méthode qui conduit à des calculs souvent beaucoup plus simples, parfois appelée "seconde quantification". Cette description est basée sur l'utilisation dans un "espace de Fock" d'opérateurs d'annihilation a_i et de création a_i^\dagger , qui respectivement détruisent ou créent une particule dans un état $|u_i\rangle$ appartenant à une base orthonormée. Les relations de commutation ou d'anti-commutation de ces opérateurs sont parfaitement équivalentes aux propriétés de symétrie des fonctions d'ondes imposées par le postulat de symétrisation du Chapitre XIV. La méthode est illustrée par l'étude de nombreux exemples, comme les propriétés des électrons dans un solide ou celles des atomes identiques dans un gaz à très basse température. Dans les approximations de "champ moyen", souvent utilisées pour prendre en compte les interactions entre particules, l'évolution de chaque particule dans un système de N particules est décrite comme résultant de l'interaction moyenne de cette particule avec les $N - 1$ autres. On établit ainsi les équations de Hartree-Fock (pour des fermions) et de Gross-Pitaevskii (pour des bosons). L'étude de l'équation de Gross-Pitaevskii permet en particulier de comprendre certains aspects d'un phénomène physique important, la superfluidité des bosons. Nous présentons également le phénomène d'appariement en mécanique quantique, de façon unifiée en traitant dans le même cadre général fermions (condensation "BCS" pour Bardeen-Cooper-Schrieffer) et bosons (théorie de Bogolubov). Pour des fermions, la théorie BCS est à la base de notre compréhension de la supraconductivité dans les métaux. Notre étude des états appariés permet également de discuter dans quelle mesure un système de deux fermions appariés peut se comporter comme un boson. Mentionnons enfin que, dans le cas où la base $|u_i\rangle$ est la base $|\mathbf{r}\rangle$ des états propres de l'opérateur position, les opérateurs d'annihilation et de création $\psi(\mathbf{r})$ et $\psi^\dagger(\mathbf{r})$ sont des champs d'opérateurs et constituent un exemple de "champ quantique". Ainsi, la valeur moyenne $\langle \psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \psi^\dagger(\mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1) \rangle$ est une "fonction de corrélation" spatiale, décrivant comment la détection d'une particule en \mathbf{r}_1 influence la détection d'une autre particule en \mathbf{r}_2 . On peut ainsi obtenir un nouvel éclairage sur les interférences spatiales en physique quantique; elles sont associées, non plus à une interférence entre deux ondes classiques, mais à une interférence entre deux amplitudes de probabilité quantiques associées à deux chemins différents conduisant le système d'un même état initial à un même état final.

Un second grand sujet abordé dans ce tome III est la théorie quantique du champ électromagnétique. Certes, le Chapitre XIII du tome II abordait la description des interactions matière-rayonnement, mais uniquement dans le cadre de la

théorie des perturbations dépendant du temps où le champ est décrit classiquement ; des notions essentielles, comme par exemple celle d'émission spontanée, sont alors perdues. De surcroît, la compréhension de phénomènes couramment observés (par exemple en optique quantique) requiert une description quantique du rayonnement. Nous avons donc consacré plusieurs chapitres à ces sujets. Afin de partir d'une base solide, nous commençons au Chapitre XVIII par des rappels d'électromagnétisme classique, ce qui a l'avantage de considérablement simplifier l'exposé de la quantification. Cette dernière est ensuite introduite au Chapitre XIX avec la présentation d'une théorie quantique du champ électromagnétique de manière aussi simple que possible, ainsi que de ses interactions avec les atomes. Nous montrons ainsi comment apparaissent les excitations élémentaires du champ, les photons. Les processus fondamentaux d'interaction atomes-photons (absorption, émissions induite et spontanée) sont introduits, y compris la photo-ionisation (absorption d'un photon faisant passer l'atome de son état fondamental vers le continuum d'ionisation). L'accent est mis aussi sur les lois de conservation du moment cinétique total et de l'impulsion totale lors de l'absorption d'un photon par un atome. Ces lois sont en effet à la base de méthodes importantes, comme le pompage optique et le refroidissement et le piégeage d'atomes par des faisceaux laser ; elles peuvent être considérées comme des outils de manipulation d'atomes par la lumière et ont donné naissance à de nombreuses applications. Des processus d'ordre supérieur, faisant intervenir plusieurs photons dans une transition entre deux niveaux atomiques, sont également étudiés. On montre aussi comment le comportement d'un atome dans un champ intense, résonnant ou quasi-résonnant, peut être interprété en termes d'atome "habillé" par les photons avec lesquels il interagit. Mentionnons enfin que, dans la théorie quantique du rayonnement, les opérateurs associés au champ électrique constituent un autre exemple de champ quantique, différent de celui mentionné plus haut pour des particules matérielles identiques. Dans ce cas également, on peut introduire des fonctions de corrélation spatiales très utiles pour comprendre comment des effets d'interférence peuvent apparaître sur la distribution des positions où sont détectés les photons, même si les deux faisceaux lumineux qui interfèrent sont incohérents (effet Hanbury Brown et Twiss).

Les corrélations entre particules matérielles ou entre photons sont un exemple important de corrélations entre deux systèmes dans la mesure où une observation effectuée sur un système modifie les prédictions sur une observation effectuée sur l'autre. Bien sûr, des corrélations peuvent aussi exister entre deux systèmes classiques. Pour souligner les différences importantes entre corrélations classiques et quantiques, nous introduisons, dans le dernier chapitre de ce tome III, la notion fondamentale d'intrication quantique : deux systèmes 1 et 2 sont intriqués si le vecteur d'état qui décrit leur état n'est pas un simple produit de deux vecteurs d'état, un pour le système 1 et un autre pour le système 2. Nous analysons en détail plusieurs conséquences physiques intéressantes d'une telle situation qui est à la base d'un domaine très actif de recherches à l'heure actuelle. Ce chapitre nous fournit ainsi l'occasion de discuter le théorème d'Einstein, Podolsky et Rosen, ainsi que celui de Bell, et de souligner certains aspects troublants de la mécanique quantique.

L'ouvrage se termine par quatre appendices, dont deux exposent une autre façon d'introduire la mécanique quantique. L'Appendice IV expose brièvement la méthode de l'intégrale de chemin de Feynman, qui constitue une procédure de quantification différente de la quantification canonique, très importante par exemple en

théorie quantique des champs. L'Appendice V contient une brève introduction aux multiplicateurs de Lagrange. L'Appendice VI contient un résumé de mécanique statistique quantique et de ses principaux résultats utilisés dans cet ouvrage. Enfin, l'Appendice VII sur la transformée de Wigner montre comment il est possible de reformuler la mécanique quantique en termes de quasi-distributions, ce qui peut d'ailleurs également fournir une procédure de quantification.

Malgré un intervalle de temps de plusieurs décennies, nous avons porté toute notre attention à conserver l'esprit des deux premiers tomes, avec un style d'exposition où toutes les étapes du raisonnement sont explicitées. Nous avons conservé la structure de l'ouvrage en chapitres et en compléments où les chapitres, au nombre de 7, peuvent être lus indépendamment des compléments; chacun de ces derniers est d'ailleurs rédigé comme un tout, de façon à pouvoir être utilisé séparément, sans nécessiter la lecture des autres compléments. Leur but est de prolonger ou d'approfondir tel ou tel aspect abordé dans le chapitre qui précède, et de présenter des applications possibles. Un point • figurant dans l'en-tête de la page de chaque complément permet au lecteur de voir immédiatement s'il se trouve dans un chapitre ou dans un complément.

En première lecture, il est déconseillé de lire tous les compléments dans l'ordre où ils se présentent. En fonction de ses intérêts et de son degré d'avancement dans la lecture, chacun pourra choisir ceux qui l'intéressent. Il sera guidé pour cela, à la fin de chaque chapitre, par une liste commentée de l'ensemble de ses compléments.

Il est indéniable que le niveau du tome III est (un peu) supérieur à celui des deux premiers tomes, qui s'adressent à ceux qui débutent en mécanique quantique. Nous n'avons pas hésité à procéder à de nombreux renvois vers les tomes I et II, au cas où le lecteur n'aurait plus en tête les bases de la théorie. Mais ce n'est pas pour autant que ce tome III se place au niveau d'un cours de mécanique quantique avancée. Nous renvoyons d'ailleurs à plusieurs reprises le lecteur à des ouvrages plus complets que le nôtre ou des références plus avancées.

Remerciements : Nicole et Dan Ostrowsky ont, à l'occasion de leur traduction du texte en anglais, proposé de nombreuses améliorations ou clarifications, et nous leur en sommes très reconnaissants. Nombreux sont en fait les collègues et amis qui ont grandement contribué à la mise au point de cet ouvrage. Cela nous a d'autant plus aidés que chacun, dans son style propre, nous a apporté des remarques et suggestions complémentaires, et toujours utiles. Tous nos remerciements vont donc en particulier à :

Pierre-François Cohadon
Jean Dalibard
Sébastien Gleyzes
Markus Holzmann
Thibaut Jacqmin
Philippe Jacquier
Amaury Mouchet
Jean-Michel Raimond
Félix Werner

De plus, Marco Picco et Pierre Cladé nous ont grandement aidés à maîtriser certains aspects délicats de la typographie Latex. Roger Balian, Edouard Brézin et William Mullin nous ont fait bénéficier d'utiles conseils et suggestions. Enfin, pour un certain nombre de figures, nous remercions vivement pour leur aide Geneviève Tastevin, Pierre-François Cohadon et Samuel Deléglise

Chapitre XV

Opérateurs de création et d'annihilation pour des particules identiques

A	Formalisme général	2
A-1	Etats et espace de Fock	3
A-2	Opérateurs de création a^\dagger	6
A-3	Opérateurs d'annihilation a	7
A-4	Opérateurs nombres d'occupation (bosons et fermions)	9
A-5	Relations de commutation ou d'anticommutation	9
A-6	Changements de base	12
B	Opérateurs symétriques à une particule	14
B-1	Définition	14
B-2	Expression en termes des opérateurs a et a^\dagger	15
B-3	Exemples	17
B-4	Opérateur densité réduit à une particule	18
C	Opérateurs à deux particules	19
C-1	Définition	19
C-2	Un cas simple : factorisation	20
C-3	Cas général	21
C-4	Opérateur densité réduit à deux particules	22
C-5	Discussion physique ; effets de l'échange	23

Introduction

Pour un système composé de particules identiques, la numérotation des particules qui apparaît dans le chapitre XIV [1, 2] n'a en fait aucun sens physique. De plus, dès que le nombre de particules dépasse quelques unités, les calculs où l'on

part de particules numérotées pour appliquer ensuite le postulat de symétrisation se révèlent souvent compliqués. Par exemple, le calcul de la valeur moyenne d'un opérateur symétrique demande de symétriser le bra, le ket, puis enfin l'opérateur, ce qui introduit un grand nombre de termes¹ ; ils semblent a priori différents, alors qu'on constate souvent à la fin du calcul que beaucoup de ces termes sont simplement égaux entre eux, ou parfois s'annulent mutuellement. Il existe cependant une méthode qui permet d'éviter ces lourdeurs, tout en étant parfaitement équivalente : l'utilisation des opérateurs de création et d'annihilation agissant dans l'espace de Fock. Le postulat de symétrisation (ou d'antisymétrisation) est alors entièrement contenu dans de simples règles de commutation (ou d'anticommutation) satisfaites par ces opérateurs de création et d'annihilation. La numérotation non physique des particules disparaît totalement, remplacée par la notion de "nombre d'occupation" des états individuels, bien plus naturelle pour des particules identiques.

La méthode exposée dans ce chapitre et le suivant est parfois appelée "seconde quantification"². Elle met en jeu des opérateurs qui ne conservent pas le nombre de particules, agissant ainsi dans un espace des états plus vaste que ceux que nous avons considérés jusqu'ici ; ce nouvel espace est appelé "espace de Fock" (§ A). Ces opérateurs qui changent le nombre de particules apparaissent cependant surtout comme des intermédiaires de calcul, qui souvent se regroupent de façon qu'au bout du compte le nombre total de particules reste bien conservé. Nous en verrons des exemples avec l'expression des opérateurs symétriques à une particule (§ B), tels que l'impulsion totale ou le moment angulaire total d'un système de particules identiques. Nous étudierons ensuite les opérateurs symétriques à deux particules (§ C), comme l'énergie d'un système de particules identiques en interaction, leur fonction de corrélation spatiale, etc. En mécanique statistique quantique, l'utilisation de l'espace de Fock est bien adaptée aux calculs effectués dans le cadre de l'ensemble "grand canonique", où l'on autorise des fluctuations du nombre total de particules par échange avec un réservoir extérieur. De plus, et comme nous le verrons dans les chapitres suivants, cet espace de Fock est particulièrement bien adapté à la prise en compte des processus physiques où le nombre de particules varie, par exemple l'absorption ou l'émission de photons.

A. Formalisme général

Nous appelons \mathcal{E}_N l'espace des états d'un système de N particules discernables, produit tensoriel de N espaces des états \mathcal{E}_1 individuels :

$$\mathcal{E}_N = \mathcal{E}_1(1) \otimes \mathcal{E}_1(2) \otimes \dots \otimes \mathcal{E}_1(N) \tag{A-1}$$

Deux sous-espaces de \mathcal{E}_N sont particulièrement importants pour les systèmes de particules identiques, puisqu'ils contiennent tous les états physiques qui leur sont accessibles : pour des bosons c'est l'espace $\mathcal{E}_S(N)$ des états complètement symétriques, pour des fermions l'espace $\mathcal{E}_A(N)$ des états totalement antisymétriques. Les

1. Pour un opérateur symétrique à une particule qui comprend la somme de N termes, le ket et le bra contiennent chacun $N!$ termes ; l'élément de matrice fait donc apparaître $N(N!)^2$ termes. Ce nombre devient rapidement très élevé dès que N dépasse quelques unités.

2. Cette dénomination est quelque peu illogique, puisqu'aucune nouvelle quantification ne vient se superposer à celle des postulats habituels de la mécanique quantique ; c'est plutôt la symétrisation des particules identiques qui en constitue l'ingrédient essentiel. Mais cette appellation reste souvent utilisée.

relations (B-49) et (B-50) du Chapitre XIV donnent les projecteurs sur ces deux sous-espaces :

$$S_N = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} P_{\alpha} \quad (\text{A-2})$$

et :

$$A_N = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha} \quad (\text{A-3})$$

où les P_{α} sont les $N!$ opérateurs de permutation pour les N particules et ε_{α} la parité de P_{α} (dans le présent chapitre, il est commode d'ajouter un indice N à la notation de ces projecteurs).

A-1. Etats et espace de Fock

Partant d'une base orthonormée $\{|u_k\rangle\}$ arbitraire de l'espace des états à une particule, nous avons construit au § C-3-d du Chapitre XIV une base de l'espace des états pour N particules identiques; ses vecteurs sont caractérisés par des nombres d'occupation n_i , avec :

$$n_1 + n_2 + \dots + n_k + \dots = N \quad (\text{A-4})$$

où n_1 désigne le nombre d'occupation du premier vecteur de base $|u_1\rangle$, n_2 celui de $|u_2\rangle$, ..., n_k celui de $|u_k\rangle$. Dans cette suite de nombres, certains (ou même beaucoup) peuvent être nuls : il n'y a aucune raison particulière qu'un état déterminé soit toujours occupé. Il est donc souvent commode de ne spécifier que la suite des nombres d'occupation non nuls, que nous noterons $n_i, n_j, \dots, n_l, \dots$ pour indiquer que le premier état de la base qui recueille au moins une particule est $|u_i\rangle$ avec une population n_i , le second $|u_j\rangle$ avec une population n_j , etc. Comme dans (A-4), ces nombres d'occupation se somment à N .

Remarque :

Dans ce chapitre, nous aurons constamment à utiliser des indices de types différents, qu'il ne faut pas confondre entre eux. Les indices i, j, k, l, \dots repèrent les différents vecteurs d'une base $\{|u_i\rangle\}$ dans l'espace des états \mathcal{E}_1 d'une particule; le nombre de valeurs que peut prendre chacun d'entre eux est donné par la dimension de cet espace des états – d'ailleurs souvent infinie. Ils ne doivent pas être confondus avec les indices qui repèrent des particules numérotées; ces derniers prennent N valeurs différentes, que nous noterons q, q' , etc. Enfin, l'indice α distingue les différentes permutations de N particules, et peut prendre $N!$ valeurs différentes.

A-1-a. Etats de Fock pour des bosons identiques

Pour des bosons, les vecteurs de base s'écrivent selon la formule (C-15) du Chapitre XIV :

$$\begin{aligned} & |n_i, n_j, \dots, n_l, \dots\rangle \\ & = c S_N |1 : u_i; 2 : u_i; \dots; n_i : u_i; n_i + 1 : u_j; \dots n_i + n_j : u_j; \dots\rangle \end{aligned} \quad (\text{A-5})$$

où c est un coefficient de normalisation ; dans le membre de droite, n_i particules sont placées dans l'état $|u_i\rangle$, n_j dans l'état $|u_j\rangle$, etc. (du fait de la symétrisation, leur ordre est sans importance).

Calculons la norme de ce membre de droite. Il comprend $N!$ termes, provenant des $N!$ permutations figurant dans S_N , mais ces termes ne sont pas tous orthogonaux entre eux : par exemple, toutes les permutations P_α qui conduisent à des redistributions des n_i premières particules entre elles, des n_j suivantes entre elles, etc. redonnent le ket initial. En revanche, dès qu'une permutation change l'état individuel d'une particule (ou plus), le ket obtenu est distinct ; il est même orthogonal au ket initial. De façon générale, les différentes permutations contenues dans S_N se regroupent ainsi en familles de $n_i!n_j!\dots n_l!\dots$ permutations équivalentes, conduisant toutes au même ket. Compte tenu du $1/N!$ qui figure dans la définition (A-2) de S_N , chacun de ces kets acquiert un coefficient $n_i!n_j!\dots n_l!\dots/N!$, et contribue donc au carré de la la norme du ket total par le carré de ce coefficient. Or le nombre de ces kets orthogonaux est $N!/n_i!n_j!\dots n_l!\dots$. C'est pourquoi, si c valait 1 dans la formule (A-5), le carré de la norme du ket ainsi défini serait :

$$\frac{N!}{n_i!n_j!\dots n_l!\dots} \left[\frac{n_i!n_j!\dots n_l!\dots}{N!} \right]^2 = \frac{n_i!n_j!\dots n_l!\dots}{N!} \quad (\text{A-6})$$

Nous choisissons donc c égal à l'inverse de la racine carrée de ce nombre, ce qui conduit au ket normé :

$$\begin{aligned} & |n_i, n_j, \dots, n_l, \dots\rangle \\ &= \sqrt{\frac{N!}{n_i!n_j!\dots n_l!\dots}} S_N |1 : u_i; 2 : u_i; \dots; n_i : u_i; n_i + 1 : u_j; \dots; n_i + n_j : u_j; \dots\rangle \end{aligned} \quad (\text{A-7})$$

Ces états sont appelés “*états de Fock*”, ou parfois “*états à nombres d'occupation*” (ou “*number states*” en anglais). Ce sont les états pour lesquels les nombres d'occupation sont bien déterminés.

Il est parfois commode d'utiliser pour les états de Fock plusieurs notations légèrement différentes, mais évidemment équivalentes. Dans (A-7), les états de Fock sont définis en spécifiant les nombres d'occupation de tous les états effectivement occupés ($n_i \geq 1$), les seuls qui apparaissent dans le membre de droite. Mais on peut également préciser tous les nombres d'occupation, y compris ceux qui sont nuls³ – c'est par exemple ce que nous avons fait implicitement dans (A-4). On écrit alors les mêmes kets sous la forme :

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_l, \dots\rangle \quad (\text{A-8})$$

Il est également possible de spécifier une liste de N états occupés, où u_i est répété n_i fois, u_j répété n_j fois, etc. :

$$|u_i, u_i, \dots, u_j, u_j, \dots, u_l, \dots\rangle \quad (\text{A-9})$$

Comme nous le verrons, cette dernière notation est parfois utile dans les calculs qui concernent à la fois bosons et fermions.

3. Rappelons que, par convention, $0! = 1$.

A-1-b. Etats de Fock pour des fermions identiques

Pour des fermions, si l'on applique l'opérateur A_N à un ket où deux (ou plusieurs) particules numérotées occupent le même état individuel, le résultat est nul : aucun état n'est obtenu dans l'espace physique $\mathcal{E}_A(N)$. Nous pouvons donc nous concentrer sur le cas où tous les nombres d'occupation valent, soit 1, soit 0. Si l'on note $|u_i\rangle, |u_j\rangle, \dots, |u_l\rangle, \dots$ les états dont le nombre d'occupation est 1, l'équivalent pour des fermions de la formule (A-7) s'écrit donc :

$$\begin{aligned}
& |u_i, u_j, \dots, u_l, \dots\rangle \\
&= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{N!}} A_N |1 : u_i; 2 : u_j; \dots; q : u_l; \dots\rangle & \text{si tous les } u_i \text{ sont différents} \\ 0 & \text{si deux } u_i \text{ sont identiques} \end{cases}
\end{aligned} \tag{A-10}$$

Compte tenu du facteur $1/N!$ qui apparaît dans la définition (A-3) de A_N , le ket de droite dans cette équation est une superposition linéaire avec des coefficients $1/\sqrt{N!}$ de $N!$ kets qui sont tous orthogonaux entre eux (rappelons que nous avons choisi une base orthonormée d'états individuels $\{|u_k\rangle\}$) ; il est donc normé. L'égalité (A-10) définit donc les états de Fock pour des fermions. Contrairement aux bosons, ce n'est plus ici la notion de nombre d'occupation qui joue un rôle central, mais celle d'états occupés (ou vides).

Une autre différence avec le cas des bosons est que l'ordre des états n'est pas indifférent pour des fermions. Si par exemple l'on permute les deux premiers états u_i et u_j , on aboutit au ket opposé :

$$|u_j, u_i, \dots, u_l, \dots\rangle = -|u_i, u_j, \dots, u_l, \dots\rangle \tag{A-11}$$

mais cela ne modifie évidemment pas le contenu physique du ket.

A-1-c. Espace de Fock

Les états de Fock constituent les briques élémentaires avec lesquelles sera construit tout ce chapitre. Nous avons jusqu'ici considéré séparément les espaces $\mathcal{E}_{S,A}(N)$ associés à des valeurs différentes du nombre de particules N . Nous allons maintenant les regrouper tous ensemble en définissant un seul espace des états, dit "*espace de Fock*", qui les associe par une somme directe⁴. Pour des bosons :

$$\mathcal{E}_{Fock}^S = \mathcal{E}_S(0) \oplus \mathcal{E}_S(1) \oplus \mathcal{E}_S(2) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}_S(N) \oplus \dots \tag{A-12}$$

et, pour des fermions :

$$\mathcal{E}_{Fock}^A = \mathcal{E}_A(0) \oplus \mathcal{E}_A(1) \oplus \mathcal{E}_A(2) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}_A(N) \oplus \dots \tag{A-13}$$

(ces sommes étant infinies). Dans les deux cas, nous avons ajouté au second membre un premier terme, associé à un nombre total de particules égal à zéro. L'espace

4. La somme directe de deux espaces \mathcal{E}_P (de dimension P) et \mathcal{E}_Q (de dimension Q) est un espace \mathcal{E}_{P+Q} de dimension $P+Q$, engendré par toutes les combinaisons linéaires d'un vecteur du premier espace avec un vecteur du second. Une base de \mathcal{E}_{P+Q} est simplement obtenue en regroupant une base de \mathcal{E}_P et une de \mathcal{E}_Q . Par exemple, les vecteurs du plan à 2 dimensions appartiennent à un espace qui est la somme directe des espaces à une dimension des vecteurs de deux axes de ce plan.

correspondant $\mathcal{E}_{S,A}(0)$ est défini comme un espace à une seule dimension, contenant un état unique appelé “le vide” et noté $|0\rangle$ (également symbolisé par $|\text{vac}\rangle$ pour “*vacuum*” dans la littérature anglo-saxonne).

Pour des bosons comme pour des fermions, une base orthonormée de l'espace de Fock peut être obtenue en prenant les états de Fock $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_l, \dots\rangle$ et en omettant la contrainte (A-4) : les nombres d'occupation deviennent alors entièrement libres de prendre des valeurs (entières) quelconques, y compris la nullité pour tous qui donne le ket du vide $|0\rangle$. Par combinaison linéaire de ces vecteurs de base, on obtient tous les vecteurs de l'espace de Fock, en particulier des superpositions linéaires de kets contenant des nombres de particules différents ; il n'est pas indispensable d'attribuer une signification physique à de telles superpositions, qu'on pourra considérer comme de simples intermédiaires de calcul. Bien sûr, il existe également au sein de l'espace de Fock de nombreux kets où le nombre de particules est parfaitement défini : tous ceux qui appartiennent à un seul sous-espace, $\mathcal{E}_S(N)$ pour des bosons, $\mathcal{E}_A(N)$ pour des fermions. Deux kets qui diffèrent par le nombre de particules N sont toujours orthogonaux ; par exemple, tous les kets à population totale non nulle sont orthogonaux au vide.

Remarques :

(i) Contrairement à ce qui se passerait pour des particules discernables, l'espace de Fock n'est pas le produit tensoriel d'espaces des états associés à des particules numérotées $1, 2, \dots, q, \dots$. En premier lieu, pour N fixé, il est restreint au sous-espace totalement symétrique (ou antisymétrique) de ce produit tensoriel ; de plus, l'espace de Fock est une somme directe de tels sous-espaces associés à chaque valeur du nombre de particules N .

En revanche, l'espace de Fock est bien le produit tensoriel d'espaces de Fock $\mathcal{E}_{Fock}^{u_i}$ associés aux états individuels orthogonaux $|u_i\rangle$, chacun engendré par des kets $|n_i\rangle$ où n_i varie par valeurs entières (de zéro à l'infini pour des bosons, de zéro à un pour des fermions) :

$$\mathcal{E}_{Fock}^{S,A} = \mathcal{E}_{Fock}^{u_1} \otimes \mathcal{E}_{Fock}^{u_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{E}_{Fock}^{u_i} \otimes \dots \tag{A-14}$$

En effet les états de Fock, qui constituent une base de $\mathcal{E}_{Fock}^{S,A}$, peuvent s'écrire comme des produits tensoriels :

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_i\rangle \otimes \dots \tag{A-15}$$

On dit souvent que chaque état individuel définit un “mode” pour le système de particules identiques. La structure de produit tensoriel de l'espace de Fock permet de considérer les modes comme décrivant des variables différentes et discernables. Cette structure nous sera utile à plusieurs reprises, par exemple dans les Compléments B_{XV}, D_{XV} et E_{XV}.

(ii) Il ne faut pas confondre état de Fock avec état (quelconque) de l'espace de Fock. Les nombres d'occupation des états individuels sont tous bien définis dans un état de Fock (en anglais, on parle parfois de “*number state*”). En revanche, un état quelconque de l'espace de Fock est en général une superposition linéaire de ces états propres dont plusieurs coefficients sont non nuls.

A-2. Opérateurs de création a^\dagger

Choisissant une base donnée d'états individuels $\{|u_i\rangle\}$, nous définissons maintenant l'action dans l'espace de Fock de l'opérateur ⁵ de création $a_{u_i}^\dagger$ d'une particule

5. On notera l'analogie de notation avec l'oscillateur harmonique.

dans l'état $|u_i\rangle$.

A-2-a. Bosons

Pour des bosons, nous introduisons l'opérateur linéaire $a_{u_i}^\dagger$ défini par :

$$a_{u_i}^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (\text{A-16})$$

Comme les $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ permettent, par superposition linéaire, d'engendrer tous les états de l'espace de Fock, l'action de $a_{u_i}^\dagger$ est alors bien définie dans tout l'espace. Il ajoute une particule au système, faisant passer d'un état de $\mathcal{E}_S(N)$ à un état de $\mathcal{E}_S(N + 1)$, et en particulier du vide à un état où est peuplé un seul état individuel.

Les opérateurs de création permettent d'exprimer les états à nombres d'occupation à partir du vide. Par application récurrente de (A-16), on obtient en effet :

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_i! \dots}} [a_{u_1}^\dagger]^{n_1} [a_{u_2}^\dagger]^{n_2} \dots [a_{u_i}^\dagger]^{n_i} \dots |0\rangle \quad (\text{A-17})$$

Remarque :

On peut se demander pourquoi introduire le facteur $\sqrt{n_i + 1}$ dans (A-16) ; nous verrons plus loin (§ B) qu'en fait ce facteur se combine commodément avec ceux de (A-7) pour simplifier les calculs.

A-2-b. Fermions

Pour des fermions, nous définissons l'opérateur $a_{u_i}^\dagger$ par :

$$a_{u_i}^\dagger |u_j, \dots, u_k, \dots, u_l, \dots\rangle = |u_i, u_j, \dots, u_k, \dots, u_l, \dots\rangle \quad (\text{A-18})$$

où l'état créé $|u_i\rangle$ figure en tête de la liste des états du ket de droite. Si, dans le ket de départ, l'état individuel $|u_i\rangle$ est déjà occupé ($n_i = 1$), l'application de $a_{u_i}^\dagger$ aboutit au ket nul, puisque dans ce cas :

$$a_{u_i}^\dagger |u_j, \dots, u_i, \dots, u_l, \dots\rangle = |u_i, u_j, \dots, u_i, \dots, u_l, \dots\rangle = 0 \quad (\text{A-19})$$

Les formules (A-16) et (A-17) sont également valables pour des fermions, où tous les nombres d'occupation sont égaux à 0 ou 1 (sinon les deux membres sont nuls).

Remarque :

La définition (A-18) doit rester cohérente si l'on change l'ordre des états individuels $u_j, \dots, u_k, \dots, u_l, \dots$ dans le ket sur lequel agit $a_{u_i}^\dagger$. Il est facile de vérifier que toute permutation des états a pour seul effet de multiplier par sa parité les deux membres de l'égalité. Cette dernière reste donc valable indépendamment de l'ordre choisi au départ pour les états individuels.

A-3. Opérateurs d'annihilation a

Nous étudions maintenant l'opérateur hermitique conjugué de $a_{u_i}^\dagger$, que nous notons simplement a_{u_i} puisque deux conjuguaisons hermitiques successives d'un opérateur ramènent à l'opérateur initial.

A-3-a. Bosons

Pour des bosons, on déduit de (A-16) que les seuls éléments de matrice non nuls de $a_{u_i}^\dagger$ dans la base orthonormée des états de Fock sont :

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots | a_{u_i}^\dagger | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i + 1} \quad (\text{A-20})$$

Ils relient donc deux vecteurs dont les nombres d'occupation sont tous égaux, sauf n_i qui augmente d'une unité du ket au bra.

La définition générale (B-49) du Chapitre II détermine les éléments de matrice de l'opérateur adjoint de $a_{u_i}^\dagger$. Compte tenu de (A-20), les seuls éléments de matrice non nuls de a_{u_i} sont donc :

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots | a_{u_i} | n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots \rangle = \sqrt{n_i + 1} \quad (\text{A-21})$$

Puisque la base est complète, il en découle que l'action de a_i sur des kets à nombres d'occupation déterminés est donnée par :

$$a_{u_i} | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i} | n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots \rangle \quad (\text{A-22})$$

(nous avons changé n_i en $n_i - 1$). Contrairement à $a_{u_i}^\dagger$, qui ajoute une particule dans l'état $|u_i\rangle$, l'opérateur a_{u_i} en supprime une ; il donne zéro s'il est appliqué à un ket où l'état $|u_i\rangle$ n'est pas peuplé, en particulier l'état du vide :

$$a_{u_i} |0\rangle = 0 \quad (\text{A-23})$$

On appelle a_{u_i} “opérateur d'annihilation” dans l'état $|u_i\rangle$.

A-3-b. Fermions

Pour des fermions, la relation (A-18) permet d'expliciter les éléments de matrice :

$$\langle u_i, u_j, \dots, u_k, \dots, u_l, \dots | a_{u_i}^\dagger | u_j, \dots, u_k, \dots, u_l, \dots \rangle = 1 \quad (\text{A-24})$$

Seuls sont non nuls ceux où tous les états individuels occupés restent inchangés entre bra et ket, sauf l'état u_i qui est absent du ket mais présent dans le bra. En termes de nombres d'occupation, aucun d'entre eux ne change, sauf n_i qui passe de 0 (dans le ket) à 1 (dans le bra).

L'opération de conjugaison hermitique donne alors l'action de l'opérateur d'annihilation correspondant :

$$a_{u_i} | u_i, u_j, u_k, \dots, u_l, \dots \rangle = | u_j, u_k, \dots, u_l, \dots \rangle \quad (\text{A-25})$$

ou, si l'état $|u_i\rangle$ n'est pas occupé :

$$a_{u_i} | u_j, u_k, \dots, u_l, \dots \rangle = 0 \quad (\text{A-26})$$

Les relations (A-22) et (A-23) sont valables également pour des fermions, avec ici aussi la contrainte de garder tous les nombres d'occupation égaux à 0 ou 1 ; dans le cas contraire, l'équation se réduit à $0 = 0$.

Remarque :

Pour pouvoir appliquer la relation (A-25) lorsque l'état $|u_i\rangle$ est déjà occupé mais ne figure pas en première position, il faut d'abord l'y amener ; si cela nécessite une permutation impaire, il en découle un changement de signe. Par exemple :

$$a_{u_2} |u_1, u_2\rangle = - |u_1\rangle \quad (\text{A-27})$$

Ainsi, pour des fermions, l'action des deux opérateurs a et a^\dagger concerne l'état individuel qui figure en tête de la liste des états individuels dans le ket à N particules ; a détruit le premier état dans la liste, a^\dagger crée un nouvel état qui se place en premier. Oublier cette propriété pourrait conduire à des fautes de signe.

A-4. Opérateurs nombres d'occupation (bosons et fermions)

Considérons l'opérateur \hat{n}_{u_i} défini par :

$$\hat{n}_{u_i} = a_{u_i}^\dagger a_{u_i} \quad (\text{A-28})$$

et son effet sur un état de Fock. Pour des bosons, si nous appliquons successivement les formules (A-22) et (A-16), nous voyons que cet opérateur redonne le même état de Fock, simplement multiplié par son nombre d'occupation n_i . Pour des fermions, si la population de l'état $|u_i\rangle$ dans l'état de Fock est nulle, la relation (A-26) montre immédiatement que l'action de l'opérateur \hat{n}_{u_i} donne zéro. Si l'état $|u_i\rangle$ est déjà occupé, on commence par permuter les états pour amener $|u_i\rangle$ en tête, ce qui implique éventuellement un changement de signe du ket associé ; l'application successive de (A-25) et (A-19) à ce dernier ket montre alors que l'action de l'opérateur \hat{n}_{u_i} ne le change pas ; enfin, on rétablit l'état $|u_i\rangle$ à la place qu'il occupait initialement, ce qui introduit éventuellement un second changement de signe qui compense le premier. Pour finir, on obtient le même résultat que pour les bosons, avec n_i restreint aux valeurs 1 et 0 pour des fermions.

Dans les deux cas, l'opérateur \hat{n}_{u_i} admet donc les états de Fock comme vecteurs propres avec comme valeurs propres les nombres d'occupation ; c'est pourquoi on l'appelle opérateur “nombre d'occupation de l'état $|u_i\rangle$ ”. L'opérateur \hat{N} associé au nombre total de particules est simplement la somme :

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_{u_i} = \sum_i a_{u_i}^\dagger a_{u_i} \quad (\text{A-29})$$

A-5. Relations de commutation ou d'anticommutation

Les opérateurs de création et d'annihilation possèdent des propriétés de commutation (pour les bosons) ou d'anticommutation (pour les fermions) particulièrement simples, qui permettent de tenir compte très commodément de la symétrisation ou de l'antisymétrisation des vecteurs d'état.

Pour simplifier la notation, nous écrirons à partir de maintenant a_i au lieu de a_{u_i} chaque fois qu'il sera évident que toutes les équations se réfèrent à une seule base d'états individuels $\{|u_i\rangle\}$. En revanche, chaque fois qu'il peut y avoir ambiguïté, nous reviendrons à la notation complète.

A-5-a. Bosons : relations de commutation

Pour des bosons, considérons deux opérateurs a_i^\dagger et a_j^\dagger . Si les deux indices i et j sont différents, ils correspondent à des états $|u_i\rangle$ et $|u_j\rangle$ orthogonaux ; l'application répétée de (A-16) donne alors immédiatement :

$$a_i^\dagger a_j^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots, n_j + 1, \dots\rangle \quad (\text{A-30})$$

Si maintenant on applique les deux opérateurs dans l'ordre inverse, on aboutit au même résultat. Comme les états de Fock constituent une base, il en découle que le commutateur de a_i^\dagger et a_j^\dagger s'annule si $i \neq j$. De même, on voit facilement que les deux produits d'opérateurs $a_i a_j$ et $a_j a_i$ agissant sur le même ket conduisent au même résultat (où, cette fois, deux nombres d'occupation ont décréu de 1) ; a_i et a_j commutent donc si $i \neq j$. Enfin, le même raisonnement mène facilement à la commutation de a_i et a_j^\dagger si $i \neq j$.

Si maintenant $i = j$, le commutateur à évaluer est celui de a_i avec a_i^\dagger . Appliquons successivement (A-16) et (A-22), dans cet ordre ou dans l'ordre inverse :

$$\begin{aligned} a_i a_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= (n_i + 1) |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \\ a_i^\dagger a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= (n_i) |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \end{aligned} \quad (\text{A-31})$$

Le commutateur de a_i avec a_i^\dagger vaut donc 1 pour toute valeur de i .

L'ensemble des résultats précédents est résumé dans les trois égalités, valables pour des bosons :

$$[a_i, a_j] = 0 \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (\text{A-32})$$

A-5-b. Fermions : relations d'anticommutation

Pour des fermions, commençons à nouveau par supposer que les deux indices i et j sont différents. L'action successive de a_i^\dagger et de a_j^\dagger sur un ket à nombres d'occupation n'aboutit à un ket non nul que si $n_i = n_j = 0$; l'application répétée de (A-18) conduit à :

$$a_i^\dagger a_j^\dagger |u_k, u_l, \dots, u_m, \dots\rangle = |u_i, u_j, u_k, u_l, \dots, u_m, \dots\rangle \quad (\text{A-33})$$

mais :

$$a_j^\dagger a_i^\dagger |u_k, u_l, \dots, u_m, \dots\rangle = |u_j, u_i, u_k, u_l, \dots, u_m, \dots\rangle = - |u_i, u_j, u_k, u_l, \dots, u_m, \dots\rangle \quad (\text{A-34})$$

Ainsi, le changement de signe qui accompagne l'interversion de l'ordre des états individuels se traduit ici par :

$$a_i^\dagger a_j^\dagger = -a_j^\dagger a_i^\dagger \quad \text{si } i \neq j \quad (\text{A-35})$$

Si l'on définit l'anticommutateur $[A, B]_+$ de deux opérateurs A et B par :

$$[A, B]_+ = AB + BA \quad (\text{A-36})$$

on peut écrire (A-35) sous la forme :

$$\left[a_i^\dagger, a_j^\dagger \right]_+ = 0 \quad \text{si } i \neq j \quad (\text{A-37})$$

Par conjugaison hermitique de (A-35), on obtient :

$$a_j a_i = -a_i a_j \quad \text{si } i \neq j \quad (\text{A-38})$$

soit :

$$[a_i, a_j]_+ = 0 \quad \text{si } i \neq j \quad (\text{A-39})$$

Enfin, si l'on calcule l'anticommutateur de a_i et a_j^\dagger par la même méthode, on constate que le résultat est nul sauf par action sur un ket où $n_i = 1$ et $n_j = 0$; ces deux nombres d'occupation sont alors échangés. Explicitons le calcul :

$$a_i^\dagger a_i |u_i, u_l, \dots, u_m, \dots\rangle = a_j^\dagger |u_l, \dots, u_m, \dots\rangle = |u_j, u_l, \dots, u_m, \dots\rangle \quad (\text{A-40})$$

et :

$$\begin{aligned} a_i a_j^\dagger |u_i, u_l, \dots, u_m, \dots\rangle &= a_i |u_j, u_i, u_l, \dots, u_m, \dots\rangle \\ &= -a_i |u_i, u_j, u_l, \dots, u_m, \dots\rangle = -|u_j, u_l, \dots, u_m, \dots\rangle \end{aligned} \quad (\text{A-41})$$

Ainsi, la somme des deux résultats est nulle, ce qui entraîne la nullité de l'anticommutateur :

$$\left[a_i, a_j^\dagger \right]_+ = 0 \quad \text{si } i \neq j \quad (\text{A-42})$$

Dans le cas où $i = j$, la contrainte sur les nombres d'occupation (interdiction de dépasser la valeur 1) implique :

$$[a_i]^2 = 0 \quad \text{et} \quad [a_i^\dagger]^2 = 0 \quad (\text{A-43})$$

Les égalités (A-37) et (A-39) restent donc valables lorsque i et j deviennent égaux; il nous reste à calculer l'anticommutateur de a_i et a_i^\dagger . Examinons d'abord le produit $a_i a_i^\dagger$; il donne zéro si on l'applique à un ket où le nombre d'occupation est $n_i = 1$, mais laisse inchangé tout ket ayant $n_i = 0$, puisque la particule créée par a_i^\dagger est aussitôt annihilée par a_i . La conclusion est inversée pour le produit dans l'ordre contraire $a_i^\dagger a_i$: son action donne zéro si $n_i = 0$, et ne change pas le ket si $n_i = 1$. Pour finir, quel que soit le ket à nombres d'occupation, un des termes de l'anticommutateur donne zéro, l'autre 1, et le résultat global est toujours une multiplication par l'unité. Donc :

$$\left[a_i, a_i^\dagger \right]_+ = 1 \quad (\text{A-44})$$

L'ensemble des résultats précédents est résumé dans les trois égalités, valables pour des fermions :

$$[a_i, a_j]_+ = 0 \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_+ = 0 \quad [a_i, a_j^\dagger]_+ = \delta_{ij} \quad (\text{A-45})$$

qui constituent, pour des fermions, l'analogie des relations (A-32) pour des bosons.

A-5-c. Formulation commune des relations

Pour réunir les résultats relatifs aux bosons et fermions dans des égalités communes, introduisons la notation :

$$[A, B]_{-\eta} = AB - \eta BA \quad (\text{A-46})$$

avec :

$$\begin{aligned} \eta = 1 & \quad \text{pour des bosons} \\ \eta = -1 & \quad \text{pour des fermions} \end{aligned} \quad (\text{A-47})$$

de sorte que (A-46) signifie le commutateur pour des bosons et l'anticommutateur pour des fermions. Alors :

$$\begin{aligned} [a_i, a_j]_{-\eta} &= 0 \quad \text{pour tous } i \text{ et } j \text{ (égaux ou différents)} \\ [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_{-\eta} &= 0 \quad \text{pour tous } i \text{ et } j \text{ (égaux ou différents)} \end{aligned} \quad (\text{A-48})$$

et les seules combinaisons non nulles sont :

$$[a_i, a_j^\dagger]_{-\eta} = \delta_{ij} \quad [a_i^\dagger, a_j]_{-\eta} = -\eta \delta_{ij} \quad (\text{A-49})$$

A-6. Changements de base

Examinons quels sont les effets sur les opérateurs de création et d'annihilation d'un changement de base pour les états individuels. Les opérateurs $a_{u_i}^\dagger$ et a_{u_i} ont été définis par leur action sur les états de Fock, eux-mêmes définis à partir des relations (A-7) et (A-10) qui impliquent l'adoption d'une base donnée d'états individuels $\{|u_i\rangle\}$. Mais on peut également choisir toute autre base orthonormée $\{|v_s\rangle\}$ et définir de la même façon des bases de Fock et opérateurs de création $a_{v_s}^\dagger$ et d'annihilation a_{v_s} . Quelle est alors la relation entre les opérateurs définis dans la nouvelle base et les opérateurs initiaux ?

S'il s'agit d'opérateurs de création agissant sur l'état du vide $|0\rangle$, la réponse à la question est presque évidente. En effet l'action de $a_{v_s}^\dagger$ sur $|0\rangle$ donne un ket à une seule particule, qui s'écrit :

$$a_{v_s}^\dagger |0\rangle = |1 : v_s\rangle = \sum_i \langle u_i | v_s \rangle |1 : u_i\rangle = \sum_i \langle u_i | v_s \rangle a_{u_i}^\dagger |0\rangle \quad (\text{A-50})$$

Ce résultat laisse escompter une simple relation linéaire du type :

$$a_{v_s}^\dagger = \sum_i \langle u_i | v_s \rangle a_{u_i}^\dagger \quad (\text{A-51})$$

ainsi que la relation hermitique conjuguée :

$$a_{v_s} = \sum_i \langle v_s | u_i \rangle a_{u_i} \quad (\text{A-52})$$

L'égalité (A-51) implique que les opérateurs de création se transforment par la même relation unitaire que les états individuels eux-mêmes. Les relations de commutation ou d'anticommutation sont alors bien conservées, puisque :

$$[a_{v_s}, a_{v_t}^\dagger]_{-\eta} = \sum_{i,j} \langle v_s | u_i \rangle \langle u_j | v_t \rangle [a_{u_i}, a_{u_j}^\dagger]_{-\eta} = \sum_{i,j} \langle v_s | u_i \rangle \langle u_j | v_t \rangle \delta_{ij} \quad (\text{A-53})$$

soit :

$$[a_{v_s}, a_{v_t}^\dagger]_{-\eta} = \sum_i \langle v_s | u_i \rangle \langle u_i | v_t \rangle = \delta_{st} \quad (\text{A-54})$$

comme il se doit. D'autre part, il est évident que les opérateurs de création commutent (anti-commutent) entre eux, ainsi que les opérateurs d'annihilation.

Equivalence des deux bases

Ceci n'est cependant pas suffisant pour montrer l'équivalence complète entre les deux bases. Pour ce faire, deux approches sont possibles. Dans la première, on définit les opérateurs de création et d'annihilation dans la nouvelle base par (A-51) et (A-52), et on définit les états de Fock associés à la nouvelle base en remplaçant les $a_{u_i}^\dagger$ par les $a_{v_s}^\dagger$ dans les relations (A-17) pour des bosons, et (A-18) pour des fermions. Il faut alors montrer que ces nouveaux états de Fock sont toujours reliés aux états à particules numérotées comme dans (A-7) pour des bosons, et (A-10) pour des fermions. La complète équivalence des constructions des deux bases de Fock est alors établie.

La seconde approche, celle que nous adopterons, traite les deux bases de façon complètement symétrique ; on considère que ce sont les relations (A-7) et (A-10), après remplacement des u_i par les v_s , qui définissent la nouvelle base de Fock. On définit ensuite les opérateurs $a_{v_s}^\dagger$ par la transposition des relations (A-17) et (A-18) à la nouvelle base. Il faut alors vérifier que ces opérateurs sont bien donnés par (A-51), sans nous limiter comme en (A-50) à leur effet sur le vide.

(i) Bosons

Les égalités (A-7) et (A-17) entraînent que :

$$\begin{aligned} & [a_{u_i}^\dagger]^{n_i} [a_{u_j}^\dagger]^{n_j} \dots |0\rangle \\ &= \sqrt{N!} S_N |1 : u_i; 2 : u_i; \dots; n_i : u_i; n_i + 1 : u_j; \dots; n_i + n_j : u_j; \dots\rangle \end{aligned} \quad (\text{A-55})$$

où, dans le membre de droite, les n_i premières particules occupent le même état individuel u_i , les n_j suivantes particules numérotées de $n_i + 1$ à $n_i + n_j$ l'état individuel u_j , etc. La relation équivalente dans la seconde base s'écrit :

$$\begin{aligned} & [a_{v_s}^\dagger]^{p_s} [a_{v_t}^\dagger]^{p_t} \dots |0\rangle \\ &= \sqrt{N!} S_N |1 : v_s; 2 : v_s; \dots; p_s : v_s; p_s + 1 : v_t; \dots; p_s + p_t : v_t; \dots\rangle \end{aligned} \quad (\text{A-56})$$

avec :

$$n_i + n_j + \dots = p_s + p_t + \dots = N \quad (\text{A-57})$$

Dans le second membre de (A-56), nous pouvons remplacer le premier ket $|v_s\rangle$ par :

$$|v_s\rangle = \sum_i \langle u_i | v_s \rangle |u_i\rangle \quad (\text{A-58})$$

et obtenir :

$$\sum_i \langle u_i | v_s \rangle \sqrt{N!} S_N |1 : u_i; 2 : v_s; \dots; p_s : v_s; p_s + 1 : v_t; \dots; p_s + p_t : v_t; \dots\rangle \quad (\text{A-59})$$

Procédant de même pour tous les vecteurs de base de ce second membre, nous le remplaçons par l'expression :

$$\begin{aligned} & \sum_i \langle u_i | v_s \rangle \sum_{i'} \langle u_{i'} | v_s \rangle \dots \sum_j \langle u_j | v_t \rangle \sum_{j'} \langle u_{j'} | v_t \rangle \dots \\ & \times \sqrt{N!} S_N |1 : u_i; 2 : u_{i'}; \dots; p_s + 1 : u_j; p_s + 2 : u_{j'}; \dots\rangle \end{aligned} \quad (\text{A-60})$$

soit encore⁶, compte tenu de (A-55) :

$$\left[\sum_i \langle u_i | v_s \rangle a_{u_i}^\dagger \right] \left[\sum_{i'} \langle u_{i'} | v_s \rangle a_{u_{i'}}^\dagger \right] \dots \left[\sum_j \langle u_j | v_t \rangle a_{u_j}^\dagger \right] \left[\sum_{j'} \langle u_{j'} | v_t \rangle a_{u_{j'}}^\dagger \right] \dots |0\rangle \quad (\text{A-61})$$

Ainsi, l'effet des opérateurs $[a_{v_s}^\dagger]^{p_s} [a_{v_t}^\dagger]^{p_t} \dots$ sur le vide est le même que celui des opérateurs (A-51) élevés aux puissances p_s, p_t, \dots

Mais, lorsque les nombres d'occupation p_s, p_t, \dots sont quelconques, les kets (A-56) engendrent tout l'espace de Fock. Si nous écrivons l'égalité précédente pour p_s et $p_s + 1$, nous voyons que l'effet de $a_{v_s}^\dagger$ et de $\sum_i \langle u_i | v_s \rangle a_{u_i}^\dagger$ donne le même résultat par action sur tous les kets de base de cet espace. L'égalité entre opérateurs est alors établie; la relation (A-52) s'ensuit directement par conjugaison hermitique.

(ii) Fermions

La démonstration est la même, avec la restriction que les nombres d'occupation ne dépassent pas l'unité. Comme elle ne demande aucun changement de l'ordre des opérateurs ou des états, il n'est pas nécessaire de se préoccuper de changements de signe.

B. Opérateurs symétriques à une particule

L'utilisation des opérateurs de création et d'annihilation facilite considérablement la manipulation, au sein de l'espace de Fock, des opérateurs physiques et donc symétriques (§ C-4-a-β du Chapitre XIV). Les opérateurs les plus simples à étudier sont ceux qui agissent sur une seule particule à la fois, dits "opérateurs à une particule".

B-1. Définition

Considérons un opérateur \hat{f} défini dans l'espace des états individuels; $\hat{f}(q)$ agit dans l'espace des états de la particule q . Ce peut être par exemple l'impulsion de la q -ième particule, ou son moment cinétique par rapport à l'origine; nous

6. Dans cette relation, les p_s premières sommations sont identiques, ainsi que les p_t suivantes, etc.

voulons construire ici l'opérateur associé à l'impulsion totale du système de N particules, ou son moment cinétique total, somme sur q des $\hat{f}(q)$ associés aux particules individuelles.

Un opérateur symétrique à une particule agissant dans l'espace $\mathcal{E}_S(N)$ pour des bosons – ou $\mathcal{E}_A(N)$ pour des fermions – est donc défini par :

$$\hat{F}^{(N)} = \sum_{q=1}^N \hat{f}(q) \quad (\text{B-1})$$

(contrairement aux états, qui sont symétriques pour les bosons et antisymétriques pour les fermions, les opérateurs physiques restent toujours symétriques). Nous définirons l'opérateur \hat{F} agissant dans l'espace de Fock comme celui qui agit comme $\hat{F}^{(N)}$ dans chacun des espaces $\mathcal{E}_S(N)$, ou $\mathcal{E}_A(N)$ selon les cas ; puisqu'une base dans l'espace de Fock tout entier est donnée par la réunion des bases de ces espaces pour toutes les valeurs de N , l'opérateur \hat{F} est ainsi bien défini dans la somme directe de ces sous-espaces. De façon résumée :

$$\hat{F}^{(N)} \ ; \ N = 1, 2, 3, \dots \implies \hat{F} \quad (\text{B-2})$$

Appliquer directement (B-1) permet de calculer les éléments de matrice de \hat{F} , mais parfois au prix de lourdes manipulations. Partant d'un opérateur contenant des particules numérotées, on le place entre états à particules numérotées, puis on symétrise le bra, le ket, et l'on prend en compte la symétrie de l'opérateur. Ceci introduit plusieurs sommations (sur les particules et sur les permutations), qu'il convient ensuite de regrouper de façon adéquate pour arriver à les simplifier. Mais nous allons voir qu'il existe une expression de \hat{F} en termes d'opérateurs de création et d'annihilation qui permet d'éviter tous ces intermédiaires de calcul, tout en tenant compte des propriétés de symétrie d'une façon rigoureuse.

B-2. Expression en termes des opérateurs a et a^\dagger

Choisissons une base $\{|u_i\rangle\}$ de l'espace des états individuels. Les éléments de matrice f_{kl} de l'opérateur à une particule \hat{f} sont :

$$f_{kl} = \langle u_k | \hat{f} | u_l \rangle \quad (\text{B-3})$$

qui permettent de développer l'opérateur lui-même selon :

$$\hat{f}(q) = \sum_{k,l} |q : u_k\rangle \langle q : u_k | \hat{f}(q) | q : u_l\rangle \langle q : u_l| = \sum_{k,l} f_{kl} |q : u_k\rangle \langle q : u_l| \quad (\text{B-4})$$

B-2-a. Action de $\hat{F}^{(N)}$ sur un ket à N particules

Le report de l'expression (B-4) de $\hat{f}(q)$ dans (B-1) conduit à :

$$\hat{F}^{(N)} = \sum_{k,l} f_{kl} \sum_{q=1}^N |q : u_k\rangle \langle q : u_l| \quad (\text{B-5})$$

L'action de $\widehat{F}^{(N)}$ sur un ket symétrisé du type (A-9) contient donc une somme sur k et l de termes :

$$\left[\sum_{q=1}^N |q : u_k\rangle \langle q : u_l| \right] |u_i, u_i, \dots, u_j, u_j, \dots\rangle \quad (\text{B-6})$$

avec des coefficients f_{kl} . Utilisons alors (A-7) ou (A-10) pour exprimer ce ket lorsque k et l sont donnés. Comme l'opérateur entre crochets est symétrique par échange des particules, il commute avec les deux opérateurs S_N et A_N (§ C-4-a- β du Chapitre XIV), de sorte que ce ket peut s'écrire :

$$\sqrt{\frac{N!}{n_i!n_j!\dots n_m!}} \frac{S_N}{A_N} \left[\sum_{q=1}^N |q : u_k\rangle \langle q : u_l| \right] |1 : u_i; 2 : u_i; \dots n_i : u_i; n_i + 1 : u_j, \dots; q : u_m; \dots\rangle \quad (\text{B-7})$$

Dans la somme sur q , seuls sont non nuls les termes où l'état individuel $|u_l\rangle$ coïncide avec l'état individuel $|u_m\rangle$ occupé par la particule numérotée q dans le ket de droite ; pour l donné, cette condition sélectionne n_l valeurs différentes de q (donc une ou zéro pour des fermions). Pour ces n_l termes, l'opérateur $|q : u_k\rangle \langle q : u_l|$ transforme l'état $|u_m\rangle$ en $|u_k\rangle$, puis S_N (ou A_N) reconstruit un ket symétrisé (mais non normé) :

$$\sqrt{\frac{N!}{n_i!n_j!\dots n_m!}} \frac{S_N}{A_N} |1 : u_i; \dots; n_i + 1 : u_j, \dots; q : u_k; \dots\rangle \quad (\text{B-8})$$

Ce ket reste le même quel que soit le numéro q parmi les n_l sélectionnés (pour des fermions, il est nul si l'état $|u_k\rangle$ était déjà occupé dans le ket initial). Nous distinguons alors deux cas :

(i) Si $k \neq l$, pour des bosons le ket écrit en (B-8) est égal à :

$$\sqrt{\frac{n_k + 1}{n_l}} |u_i, u_i, \dots, u_j, u_j, \dots, u_k, \dots\rangle \quad (\text{B-9})$$

où la racine carrée provient du changement des valeurs dans les deux nombres d'occupation n_k et n_l , qui affectent les coefficients numériques dans la définition (A-7) des états de Fock. Comme ce ket est obtenu n_l fois, ce coefficient se transforme en $\sqrt{(n_k + 1)n_l}$. Or ce facteur est exactement celui que donne l'action sur le même ket symétrisé de l'opérateur $a_k^\dagger a_l$, qui lui aussi supprime une particule dans l'état $|u_l\rangle$ et en crée une dans l'état $|u_k\rangle$. L'opérateur $a_k^\dagger a_l$ reproduit donc exactement l'effet de la somme sur q .

Pour des fermions, le résultat est nul sauf si l'état $|u_k\rangle$ était occupé par une particule et l'état $|u_l\rangle$ inoccupé dans le ket initial, et aucun coefficient numérique n'apparaît ; ici aussi on reproduit exactement l'effet de l'opérateur $a_k^\dagger a_l$.

(ii) Si $k = l$, pour des bosons le seul facteur numérique qui apparaît est n_l , provenant du nombre de termes de la somme sur q qui donnent le même ket symétrisé. Pour les fermions, la seule condition pour avoir un résultat non nul est que l'état $|u_l\rangle$ soit occupé, ce qui amène également un coefficient n_l . Dans les deux cas, l'effet de la somme sur q est à nouveau exactement le même que celui de l'opérateur $a_k^\dagger a_l$.

Nous obtenons donc :

$$\sum_{q=1}^N |q : u_k\rangle \langle q : u_l| = a_k^\dagger a_l \quad (\text{B-10})$$

La sommation sur k et l de (B-5) donne alors :

$$\widehat{F}^{(N)} = \sum_{k,l} f_{kl} a_k^\dagger a_l = \sum_{k,l} \langle u_k | \widehat{f} | u_l \rangle a_k^\dagger a_l \quad (\text{B-11})$$

B-2-b. Expression valable dans tout l'espace de Fock

Le second membre de (B-11) contient une expression qui est complètement indépendante de l'espace $\mathcal{E}_S(N)$ ou $\mathcal{E}_A(N)$ dans lequel a été définie l'action de l'opérateur $\widehat{F}^{(N)}$. Or, par définition, l'opérateur \widehat{F} agit comme $\widehat{F}^{(N)}$ dans chacun de ces sous-espaces de N fixé ; on peut donc simplement écrire :

$$\widehat{F} = \sum_{k,l} \langle u_k | \widehat{f} | u_l \rangle a_k^\dagger a_l \quad (\text{B-12})$$

qui est l'expression cherchée des opérateurs symétriques à une particule.

Il a ainsi été possible d'écrire ces opérateurs sous une forme valable quel que soit N , et où ne figurent plus de numéros de particules ; les opérateurs de création et d'annihilation, en nombre égal, n'agissent que sur les nombres d'occupation.

Remarque :

On peut toujours, par un changement de base $\{|u_i\rangle\}$, diagonaliser l'opérateur hermitique \widehat{f} , de sorte que :

$$f_{kl} = f_k \times \delta_{kl} \quad (\text{B-13})$$

L'égalité (B-12) se simplifie alors en :

$$\widehat{F} = \sum_k f_k a_k^\dagger a_k = \sum_k f_k \widehat{n}_k \quad (\text{B-14})$$

où $\widehat{n}_k = \widehat{n}_{u_k}$ est l'opérateur nombre de particules dans l'état $|u_k\rangle$ défini en (A-28).

B-3. Exemples

Un premier exemple, très simple, est celui de l'opérateur \widehat{N} correspondant au nombre total de particules, déjà écrit en (A-29) :

$$\widehat{N} = \sum_i \widehat{n}_i = \sum_i a_i^\dagger a_i \quad (\text{B-15})$$

Cet opérateur ne dépend pas de la base $\{|u_i\rangle\}$ choisie pour compter les particules, comme on pouvait s'y attendre. En effet, l'utilisation des transformations unitaires (A-51) et (A-52) conduit à (pour éviter toute ambiguïté, nous revenons pour un instant à l'expression plus explicite des opérateurs de création et d'annihilation) :

$$\sum_i a_i^\dagger a_{u_i} = \sum_i \sum_{s,t} \langle v_s | u_i \rangle \langle u_i | v_t \rangle a_{v_s}^\dagger a_{v_t} = \sum_{s,t} \delta_{st} a_{v_s}^\dagger a_{v_t} \quad (\text{B-16})$$

soit :

$$\widehat{N} = \sum_i a_{u_i}^\dagger a_{u_i} = \sum_s a_{v_s}^\dagger a_{v_s} \quad (\text{B-17})$$

Pour une particule sans spin, on peut également définir l'opérateur correspondant à la densité de probabilité au point \mathbf{r}_0 :

$$\widehat{f} = |\mathbf{r}_0\rangle \langle \mathbf{r}_0| \quad (\text{B-18})$$

La relation (B-12) conduit alors à l'opérateur "densité locale de particules" (ou densité "simple") suivant :

$$\widehat{D}(\mathbf{r}_0) = \sum_{k,l} u_k^*(\mathbf{r}_0) u_l(\mathbf{r}_0) a_k^\dagger a_l \quad (\text{B-19})$$

Le même raisonnement que plus haut montre que cet opérateur est indépendant de la base $\{|u_i\rangle\}$ choisie dans l'espace des états individuels.

Supposons maintenant que cette base soit celle des vecteurs propres $|\mathbf{k}_i\rangle$ de l'impulsion $\hbar\mathbf{k}_i$ d'une particule, et notons $a_{\mathbf{k}_i}$ les opérateurs d'annihilation correspondants. Alors, à l'impulsion totale du système est associé l'opérateur :

$$\widehat{\mathbf{P}} = \sum_{\mathbf{k}_i} \hbar\mathbf{k}_i a_{\mathbf{k}_i}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} = \sum_{\mathbf{k}_i} \hbar\mathbf{k}_i \widehat{n}_{\mathbf{k}_i} \quad (\text{B-20})$$

Quant à l'énergie cinétique des particules, elle est donnée par :

$$\widehat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}_i} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_i^2}{2m} a_{\mathbf{k}_i}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} = \sum_{\mathbf{k}_i} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_i^2}{2m} \widehat{n}_{\mathbf{k}_i} \quad (\text{B-21})$$

B-4. Opérateur densité réduit à une particule

Considérons la valeur moyenne $\langle \widehat{F} \rangle$ d'un opérateur à une particule \widehat{F} dans un état quantique quelconque à N particules. La relation (B-12) indique qu'elle s'exprime en fonction des valeurs moyennes de produits d'opérateurs $a_k^\dagger a_l$:

$$\langle \widehat{F} \rangle = \sum_{k,l} \langle u_k | \widehat{f} | u_l \rangle \langle a_k^\dagger a_l \rangle \quad (\text{B-22})$$

Or cette expression rappelle celle de la valeur moyenne d'un opérateur pour un système physique constitué d'une seule particule. En effet, si ce système est décrit par un opérateur densité $\widehat{\rho}_1(1)$, la valeur moyenne de tout opérateur $\widehat{f}(1)$ s'écrit (Complément E_{III}, § 4.b) :

$$\langle \widehat{f}(1) \rangle = \text{Tr} \left\{ \widehat{f}(1) \widehat{\rho}_1(1) \right\} = \sum_{k,l} \langle u_k | \widehat{f} | u_l \rangle \langle u_l | \widehat{\rho}_1 | u_k \rangle \quad (\text{B-23})$$

On rend les deux expressions identiques si, pour le système de particules identiques, on introduit un "opérateur densité réduit à une particule" $\widehat{\rho}_1$ dont les éléments de matrice sont définis par :

$$\langle u_l | \widehat{\rho}_1 | u_k \rangle = \langle a_k^\dagger a_l \rangle \quad (\text{B-24})$$

Cet opérateur réduit permet alors de calculer les valeurs moyennes de tous les opérateurs à une particule comme si le système n'en comprenait qu'une seule :

$$\langle \widehat{F} \rangle = \text{Tr} \left\{ \widehat{f} \widehat{\rho}_1 \right\} \quad (\text{B-25})$$

où la trace est prise dans l'espace des états d'une particule unique.

La trace de l'opérateur densité réduit ainsi défini n'est pas égale à l'unité, mais au nombre moyen de particules ; en effet, d'après (B-24) et (B-15) :

$$\text{Tr} \{ \widehat{\rho}_1 \} = \sum_k \langle a_k^\dagger a_k \rangle = \langle \widehat{N} \rangle \quad (\text{B-26})$$

Cette convention de normalisation s'avère commode ; par exemple, l'élément de matrice de $\widehat{\rho}_1$ diagonal en représentation position est alors directement égal à la densité locale moyenne de particules définie en (B-19) :

$$\langle \mathbf{r}_0 | \widehat{\rho}_1 | \mathbf{r}_0 \rangle = \langle \widehat{D}(\mathbf{r}_0) \rangle \quad (\text{B-27})$$

Il est cependant élémentaire de normaliser différemment l'opérateur densité réduit : il suffit de diviser le second membre de la définition (B-24) par $\langle \widehat{N} \rangle$ pour que sa trace devienne égale à l'unité.

C. Opérateurs à deux particules

Nous étendons maintenant les résultats précédents aux opérateurs à deux particules.

C-1. Définition

Considérons une grandeur physique mettant en jeu deux particules à la fois, numérotées q et q' . Elle correspond à un opérateur $\widehat{g}(q, q')$ agissant dans l'espace des états de ces deux particules (produit tensoriel des deux espaces d'états individuels). A partir de cet opérateur binaire, la façon la plus simple d'obtenir un opérateur symétrique à N particules est d'effectuer la somme des $\widehat{g}(q, q')$ sur toutes les particules q et q' , où les deux indices q et q' sont sommés de 1 à N . Cependant, la somme des termes $q = q'$ constitue en fait un opérateur à une particule, exactement du même type que ceux déjà étudiés au § B-1. Pour obtenir un opérateur qui soit réellement à deux particules, on préfère donc exclure les termes $q = q'$ et poser :

$$\widehat{G}^{(N)} = \frac{1}{2} \sum_{q, q'=1; q \neq q'}^N \widehat{g}(q, q') \quad (\text{C-1})$$

Le facteur 1/2 de cette expression est arbitraire, mais souvent commode. Si par exemple l'opérateur décrit une énergie d'interaction obtenue par la somme des contributions de toutes les paires distinctes de deux particules, $\widehat{g}(q, q')$ et $\widehat{g}(q', q)$ correspondent à la même paire et sont égaux ; chaque interaction binaire apparaît donc deux fois dans la double somme, le facteur 1/2 permettant d'éviter un double comptage. Chaque fois que $\widehat{g}(q, q') = \widehat{g}(q', q)$, il est d'ailleurs équivalent d'écrire $\widehat{G}^{(N)}$ sous

la forme :

$$\widehat{G}^{(N)} = \sum_{q < q'}^N \widehat{g}(q, q') \quad (\text{C-2})$$

Comme pour les opérateurs à une particule, l'expression (C-1) définit des opérateurs symétriques en déterminant leur action séparément dans chacun des espaces des états physiques où le nombre de particules est égal à N ; mais on peut facilement étendre cette définition dans tout l'espace de Fock, qui est leur somme directe pour toutes les valeurs de N . On obtient ainsi un opérateur plus général \widehat{G} , selon le schéma semblable à (B-2) :

$$\widehat{G}^{(N)} \quad ; \quad N = 1, 2, 3, \dots \quad \Longrightarrow \quad \widehat{G} \quad (\text{C-3})$$

C-2. Un cas simple : factorisation

Commençons par supposer que l'opérateur $\widehat{g}(q, q')$ se factorise :

$$\widehat{g}(q, q') = \widehat{f}(q)\widehat{h}(q') \quad (\text{C-4})$$

L'opérateur écrit en (C-1) devient alors :

$$\widehat{G}^{(N)} = \frac{1}{2} \sum_{q, q'=1; q \neq q'}^N \widehat{f}(q)\widehat{h}(q') = \frac{1}{2} \left[\sum_{q=1}^N \widehat{f}(q) \sum_{q'=1}^N \widehat{h}(q') - \sum_{q=1}^N \widehat{f}(q)\widehat{h}(q) \right] \quad (\text{C-5})$$

Le membre de droite de cette expression commence par un produit d'opérateurs à une particule ; utilisant (B-11), nous pouvons remplacer chacun de ses facteurs par son expression en fonction des opérateurs de création et d'annihilation :

$$\begin{aligned} \sum_{q=1}^N \widehat{f}(q) &= \sum_{i,k} \langle u_i | \widehat{f} | u_k \rangle a_i^\dagger a_k \\ \sum_{q'=1}^N \widehat{h}(q') &= \sum_{j,l} \langle u_j | \widehat{h} | u_l \rangle a_j^\dagger a_l \end{aligned} \quad (\text{C-6})$$

Quant au dernier terme du second membre de (C-5), c'est directement un opérateur à une particule :

$$\sum_{q=1}^N \widehat{f}(q)\widehat{h}(q) = \sum_{i,l} \langle u_i | \widehat{f} \widehat{h} | u_l \rangle a_i^\dagger a_l \quad (\text{C-7})$$

On a donc :

$$\widehat{G}^{(N)} = \frac{1}{2} \left[\sum_{i,j,k,l} \langle u_i | \widehat{f} | u_k \rangle \langle u_j | \widehat{h} | u_l \rangle (a_i^\dagger a_k) (a_j^\dagger a_l) - \sum_{i,l} \langle u_i | \widehat{f} \widehat{h} | u_l \rangle a_i^\dagger a_l \right] \quad (\text{C-8})$$

On peut alors utiliser les relations générales (A-49) pour modifier le produit d'opérateurs :

$$\left(a_i^\dagger a_k\right) \left(a_j^\dagger a_l\right) = \eta a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l + \delta_{jk} a_i^\dagger a_l = a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k + \delta_{jk} a_i^\dagger a_l \quad (\text{C-9})$$

Par report dans (C-8), la contribution de δ_{jk} dans le premier terme donne :

$$\sum_{i,l} \sum_k \langle u_i | \hat{f} | u_k \rangle \langle u_k | \hat{h} | u_l \rangle a_i^\dagger a_l = \sum_{i,l} \langle u_i | \hat{f} \hat{h} | u_l \rangle a_i^\dagger a_l \quad (\text{C-10})$$

qui compense exactement le second terme de (C-8). Il reste donc simplement :

$$\hat{G}^{(N)} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle u_i | \hat{f} | u_k \rangle \langle u_j | \hat{h} | u_l \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (\text{C-11})$$

Comme le second membre a la même forme dans tous les espaces de N fixé, cette expression est également valable pour l'opérateur \hat{G} agissant dans tout l'espace de Fock.

C-3. Cas général

Un opérateur quelconque à deux particules $\hat{g}(q, q')$ peut être décomposé en une somme de produits d'opérateurs à une particule :

$$\hat{g}(q, q') = \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha, \beta} \hat{f}_\alpha(q) \hat{h}_\beta(q') \quad (\text{C-12})$$

où les coefficients $c_{\alpha, \beta}$ sont des nombres⁷. L'expression (C-1) devient alors :

$$\hat{G}^{(N)} = \frac{1}{2} \sum_{q, q'=1; q \neq q'}^N \hat{g}(q, q') = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha, \beta} \sum_{q=1}^N \sum_{q'=1; q' \neq q}^N \hat{f}_\alpha(q) \hat{h}_\beta(q') \quad (\text{C-13})$$

Dans cette combinaison linéaire avec les coefficients $c_{\alpha, \beta}$, chacun des termes (pour α et β donnés) a exactement la forme (C-5), et peut donc être remplacé par l'expression (C-11). Cette substitution conduit à :

$$\hat{G}^{(N)} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha, \beta} \sum_{i,j,k,l} \langle u_i | \hat{f}_\alpha | u_k \rangle \langle u_j | \hat{h}_\beta | u_l \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (\text{C-14})$$

Le membre de droite de cette égalité a la même forme dans tous les espaces de N fixé, de sorte que ce second membre donne également l'expression de l'opérateur \hat{G} agissant dans tout l'espace de Fock. De plus, nous reconnaissons dans la sommation sur α et β l'élément de matrice de \hat{g} découlant de (C-12) :

7. L'espace des états de deux particules est le produit tensoriel des deux espaces des états individuels (§ F-4-b du Chapitre II). De même, l'espace des opérateurs agissant sur deux particules est le produit tensoriel des espaces des opérateurs agissant séparément sur ces particules. Par exemple, l'opérateur potentiel d'interaction entre deux particules peut se décomposer comme une somme de produits de deux opérateurs, le premier étant une fonction de la position de la première particule, le second une fonction de la seconde position.

$$g_{i,j,k,l} = \langle 1 : u_i; 2 : u_j | \widehat{g}(1, 2) | 1 : u_k; 2 : u_l \rangle = \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha, \beta} \langle u_i | \widehat{f}_\alpha | u_k \rangle \langle u_j | \widehat{h}_\beta | u_l \rangle \quad (\text{C-15})$$

Donc nous obtenons finalement :

$$\widehat{G} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle 1 : u_i; 2 : u_j | \widehat{g}(1, 2) | 1 : u_k; 2 : u_l \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (\text{C-16})$$

qui donne l'expression recherchée pour un opérateur symétrique à deux particules quelconque.

Comme pour les opérateurs à une particule, dans l'expression (C-16) des opérateurs symétriques à deux particules, chaque terme comporte autant d'opérateurs de création que d'annihilation. Ces opérateurs symétriques ne changent donc pas le nombre total de particules, comme il était évident avec leur définition initiale.

C-4. Opérateur densité réduit à deux particules

La relation (C-16) indique que la valeur moyenne de tout opérateur à deux particules s'écrit :

$$\langle \widehat{G} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle 1 : u_i; 2 : u_j | \widehat{g}(1, 2) | 1 : u_k; 2 : u_l \rangle \langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \rangle \quad (\text{C-17})$$

Cette expression rappelle celle de la valeur moyenne d'un opérateur $\widehat{g}(1, 2)$ pour un système de deux particules, d'opérateur densité $\widehat{\rho}_2(1, 2)$:

$$\begin{aligned} \langle \widehat{g}(1, 2) \rangle &= \sum_{i,j,k,l} \langle 1 : u_i; 2 : u_j | \widehat{g}(1, 2) | 1 : u_k; 2 : u_l \rangle \\ &\quad \times \langle 1 : u_k; 2 : u_l | \widehat{\rho}_2(1, 2) | 1 : u_i; 2 : u_j \rangle \end{aligned} \quad (\text{C-18})$$

et incite à définir un opérateur densité réduit à deux particules $\widehat{\rho}_2$ par :

$$\langle 1 : u_k; 2 : u_l | \widehat{\rho}_2 | 1 : u_i; 2 : u_j \rangle = \langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \rangle \quad (\text{C-19})$$

Dans cette définition, nous avons laissé de côté le facteur 1/2 de (C-17), car cela conduit à une normalisation de $\widehat{\rho}_2$ qui s'avère souvent plus commode ; les éléments de matrice de $\widehat{\rho}_2$ en représentation position fournissent alors directement la densité double (ainsi que les fonctions de corrélation du champ que nous étudierons au § B-3-b du Chapitre XVI). La trace de $\widehat{\rho}_2$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ \widehat{\rho}_2 \} &= \sum_{i,j} \langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i \rangle = \sum_{i,j} \langle a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - \delta_{ij} a_i^\dagger a_i \rangle \\ &= \langle \widehat{N} (\widehat{N} - 1) \rangle \end{aligned} \quad (\text{C-20})$$

Mais, bien évidemment, on peut également diviser le second membre de la définition de $\widehat{\rho}_2$, soit par 2, soit encore par un facteur $\langle \widehat{N} (\widehat{N} - 1) \rangle$ si l'on désire ramener sa trace à l'unité.

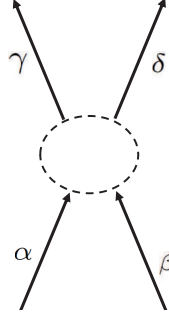


FIGURE 1 – Un processus physique d'interaction entre particules identiques où deux d'entre elles, initialement dans des états $|u_{k_\alpha}\rangle$ et $|u_{k_\beta}\rangle$ (symbolisés sur la figure par α et β), sont transférées vers des états $|u_{k_\gamma}\rangle$ et $|u_{k_\delta}\rangle$ (symbolisés par γ et δ).

C-5. Discussion physique ; effets de l'échange

Comme annoncé dans l'introduction de ce chapitre, les particules numérotées, les permutations, les symétriseurs ou antisymétriseurs ont maintenant totalement disparu des équations ; le nombre total de particules N n'apparaît pas non plus. Nous pouvons à présent reprendre la discussion donnée au § D.2 du Chapitre XIV concernant les termes d'échange, mais de façon plus générale puisque cette fois nous ne spécifions plus le nombre total de particules N .

C-5-a. Deux termes dans les éléments de matrice

Considérons un processus physique comme celui que schématise la figure 1 où, au sein d'un système de N particules identiques, se produit sous l'effet d'une interaction un transfert depuis deux états $|u_{k_\alpha}\rangle$ et $|u_{k_\beta}\rangle$ vers deux états $|u_{k_\gamma}\rangle$ et $|u_{k_\delta}\rangle$; nous supposons que les quatre états en question sont différents. Dans la sommation sur i, j, k, l de (C-16), les termes qui correspondent à ce processus sont, soit ceux pour lesquels le bra contient $i = k_\gamma$ et $j = k_\delta$, soit ceux correspondant à l'ordre inverse $i = k_\delta$ et $j = k_\gamma$; pour le ket, il contient, soit $k = k_\alpha$ et $l = k_\beta$, soit l'ordre inverse $k = k_\beta$ et $l = k_\alpha$. En tout subsistent donc quatre termes :

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \langle 1 : u_{k_\gamma} ; 2 : u_{k_\delta} | \widehat{g} | 1 : u_{k_\alpha} ; 2 : u_{k_\beta} \rangle a_{k_\gamma}^\dagger a_{k_\delta}^\dagger a_{k_\beta} a_{k_\alpha} \\
 & \frac{1}{2} \langle 1 : u_{k_\delta} ; 2 : u_{k_\gamma} | \widehat{g} | 1 : u_{k_\beta} ; 2 : u_{k_\alpha} \rangle a_{k_\delta}^\dagger a_{k_\gamma}^\dagger a_{k_\alpha} a_{k_\beta} \\
 & \frac{1}{2} \langle 1 : u_{k_\gamma} ; 2 : u_{k_\delta} | \widehat{g} | 1 : u_{k_\beta} ; 2 : u_{k_\alpha} \rangle a_{k_\gamma}^\dagger a_{k_\delta}^\dagger a_{k_\alpha} a_{k_\beta} \\
 & \frac{1}{2} \langle 1 : u_{k_\delta} ; 2 : u_{k_\gamma} | \widehat{g} | 1 : u_{k_\alpha} ; 2 : u_{k_\beta} \rangle a_{k_\delta}^\dagger a_{k_\gamma}^\dagger a_{k_\beta} a_{k_\alpha}
 \end{aligned} \tag{C-21}$$

Mais, puisque les numéros affectés aux particules se comportent ici en variables muettes, les deux premiers éléments de matrice qui apparaissent dans (C-21) sont égaux, comme le sont également ceux des deux dernières lignes. Par ailleurs, les produits d'opérateurs de création et d'annihilation satisfont les relations suivantes, pour des bosons ($\eta = 1$) comme pour des fermions ($\eta = -1$) :

$$\begin{aligned}
 a_{k_\delta}^\dagger a_{k_\gamma}^\dagger a_{k_\alpha} a_{k_\beta} &= a_{k_\gamma}^\dagger a_{k_\delta}^\dagger a_{k_\beta} a_{k_\alpha} \\
 a_{k_\gamma}^\dagger a_{k_\delta}^\dagger a_{k_\alpha} a_{k_\beta} &= a_{k_\delta}^\dagger a_{k_\gamma}^\dagger a_{k_\beta} a_{k_\alpha} = \eta a_{k_\gamma}^\dagger a_{k_\delta}^\dagger a_{k_\beta} a_{k_\alpha}
 \end{aligned} \tag{C-22}$$

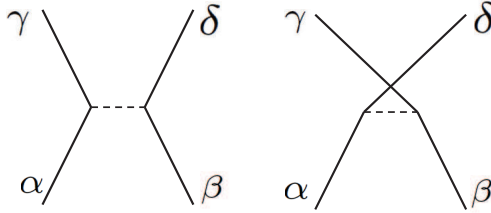


FIGURE 2 – Schématisation des deux termes apparaissant dans (C-23) par deux diagrammes, qui diffèrent par un échange des états individuels des particules dans l'état final. Ces diagrammes correspondent en quelque sorte à des "aiguillages" différents entre états entrants et sortants. Les lignes pleines représentent la propagation libre des particules, les lignes tiretées leurs interactions binaires.

Pour des bosons, ces relations sont évidentes puisqu'on ne commute que des opérateurs de création, ou des opérateurs d'annihilation ; pour les fermions, comme nous avons supposé tous les états différents, l'anticommutation d'opérateurs a , ou a^\dagger , introduit des changements de signe qui se compensent ou non suivant qu'ils sont en nombre pair ou impair. Pour finir, si nous effectuons le double de la somme du premier et du dernier terme de (C-21), nous obtenons la contribution suivante à (C-16) :

$$\begin{aligned}
 & a_{k_\gamma}^\dagger a_{k_\delta}^\dagger a_{k_\beta} a_{k_\alpha} \\
 & \times \left[\langle 1 : u_{k_\gamma} ; 2 : u_{k_\delta} | \hat{g} | 1 : u_{k_\alpha} ; 2 : u_{k_\beta} \rangle \right. \\
 & \quad \left. + \eta \langle 1 : u_{k_\delta} ; 2 : u_{k_\gamma} | \hat{g} | 1 : u_{k_\alpha} ; 2 : u_{k_\beta} \rangle \right] \quad (C-23)
 \end{aligned}$$

Nous voyons ainsi apparaître deux termes dont le signe relatif dépend de la nature (bosons ou fermions) des particules identiques. Ils correspondent à des "aiguillages" distincts entre des états individuels entrants et sortants (Fig. 2).

Pour des bosons, l'action du produit des 4 opérateurs dans (C-23) sur un ket à nombres d'occupation introduit la racine carrée :

$$\sqrt{n_{k_\alpha} n_{k_\beta} (n_{k_\gamma} + 1) (n_{k_\delta} + 1)} \quad (C-24)$$

Si les nombres d'occupation sont grands, cette racine carrée peut accroître considérablement la valeur de l'élément de matrice. Pour des fermions, cet effet d'amplification ne se produit pas ; de plus, si les éléments de matrice direct et d'échange de \hat{g} sont égaux, le terme d'échange compense le terme direct dans (C-23), et l'amplitude de transition du processus étudié s'annule.

C-5-b. Energie d'interaction entre particules, terme direct et terme d'échange

Dans de nombreux problèmes physiques, on est amené à calculer l'énergie moyenne d'interaction entre particules. Pour simplifier, nous n'étudierons ici que le cas de particules sans spin (ou, ce qui revient au même, le cas où elles sont toutes dans le même état interne de spin, de sorte que le nombre quantique correspondant

ne joue aucun rôle), et supposons les interactions binaires. L'opérateur \widehat{W}_{int} qui décrit ces interactions est alors défini comme un opérateur diagonal dans la base $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\}$ (états propres des positions de toutes les particules) qui multiplie chacun de ces états par la fonction :

$$W_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{q < q'} W_2(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_{q'}) \quad (\text{C-25})$$

Dans cette expression, la fonction $W_2(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_{q'})$ donne les éléments de matrice diagonaux de l'opérateur $\widehat{W}_2(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'})$ d'interaction de la paire de particules (q, q') . Pour obtenir les éléments de matrice de cet opérateur dans la base des $|u_k; u_l\rangle$, il suffit d'insérer une relation de fermeture sur les deux positions. On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \langle 1 : u_i; 2 : u_j | \widehat{W}_2(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) | 1 : u_k; 2 : u_l \rangle \\ = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 W_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) u_i^*(\mathbf{r}_1) u_j^*(\mathbf{r}_2) u_k(\mathbf{r}_1) u_l(\mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (\text{C-26})$$

$\alpha.$ *Expression générale*

Remplaçons dans (C-16) l'opérateur $\widehat{g}(1, 2)$ par $\widehat{W}_{\text{int}}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$; compte tenu de (C-26), nous obtenons :

$$\widehat{W}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 W_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) u_i^*(\mathbf{r}_1) u_j^*(\mathbf{r}_2) u_k(\mathbf{r}_1) u_l(\mathbf{r}_2) a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (\text{C-27})$$

La valeur moyenne, dans un état normé $|\Phi\rangle$ quelconque, de l'énergie d'interaction s'écrit donc :

$$\langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle = \langle \Phi | \widehat{W}_2 | \Phi \rangle = \frac{1}{2} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 W_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (\text{C-28})$$

où $G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ est la fonction de corrélation spatiale définie par :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i,j,k,l} u_i^*(\mathbf{r}_1) u_j^*(\mathbf{r}_2) u_k(\mathbf{r}_1) u_l(\mathbf{r}_2) \langle \Phi | a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k | \Phi \rangle \quad (\text{C-29})$$

Ainsi, la donnée de la fonction de corrélation $G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ associée à l'état quantique $|\Phi\rangle$ permet de calculer directement l'énergie moyenne d'interaction dans cet état, grâce à une double intégration spatiale.

En fait $G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ n'est autre, comme nous le verrons plus en détail au § B-3 du Chapitre XVI, que la *densité double*, égale à la densité de probabilité de trouver une particule quelconque en \mathbf{r}_1 et une autre en \mathbf{r}_2 . L'interprétation physique de (C-28) est claire : l'énergie d'interaction moyenne est égale à la somme, sur toutes les paires de particules, de l'énergie d'interaction $W_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ de cette paire multipliée par la probabilité de trouver une telle paire aux points \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 (le facteur 1/2 étant présent pour éviter le double comptage de chaque paire).

β . Cas particulier : états de Fock

Supposons maintenant que l'état $|\Phi\rangle$ soit un état de Fock, où sont spécifiés les nombres d'occupation n_i :

$$|\Phi\rangle = |n_1 : u_1; n_2 : u_2; \dots; n_i : u_i; \dots\rangle \quad (\text{C-30})$$

Il est alors possible de calculer explicitement en fonction des n_i les valeurs moyennes :

$$\langle \Phi | a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k | \Phi \rangle \quad (\text{C-31})$$

qui apparaissent dans (C-29). En premier lieu on remarque que, pour obtenir un résultat non nul, il faut que les deux opérateurs a^\dagger rétablissent des particules dans les mêmes états où les deux opérateurs a en ont annihilé; sinon l'effet des quatre opérateurs sur le ket $|\Phi\rangle$ est de donner un autre état de Fock orthogonal à celui de départ, et le résultat est nul. On a donc, soit $i = k$ et $j = l$, soit l'inverse $i = l$ et $j = k$, avec comme cas particulier celui où les quatre indices sont égaux. Le premier cas engendre ce que l'on appelle "terme direct", et le second "terme d'échange". Calculons maintenant leurs valeurs.

(i) Terme direct, $i = k$ et $j = l$, schématisé sur le diagramme de gauche de la figure 3. Si $i = j = k = l$, les quatre opérateurs agissant sur $|\Phi\rangle$ reconstruisent le même ket, multiplié par $n_i(n_i - 1)$; le résultat est nul pour des fermions. Si $i \neq j$, on peut sans changer le résultat amener l'opérateur $a_k = a_i$ juste derrière le premier opérateur a_i^\dagger pour faire apparaître l'opérateur nombre de particules n_i . En effet, pour des bosons, on change l'ordre d'opérateurs qui commutent; pour des fermions, deux anticommutations introduisent des signes moins qui se compensent. Pour les opérateurs d'indice j , ils donnent l'opérateur nombre de particules n_j . Au total, le terme direct s'écrit :

$$G_2^{\text{dir}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i \neq j} |u_i(\mathbf{r}_1)|^2 |u_j(\mathbf{r}_2)|^2 n_i n_j + \sum_i n_i(n_i - 1) |u_i(\mathbf{r}_1)|^2 |u_i(\mathbf{r}_2)|^2 \quad (\text{C-32})$$

où la dernière somme est toujours nulle pour des fermions (n_i vaut alors soit 1, soit 0).

(ii) Terme d'échange $i = l$ et $j = k$, schématisé sur le diagramme de droite de la figure 3. Le cas où les quatre indices sont égaux est déjà inclus dans le terme direct. Pour obtenir le produit d'opérateurs $n_i n_j$ à partir du produit $a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j$ il nous suffit ici de permuter les deux opérateurs centraux $a_j^\dagger a_i$; lorsque $i \neq j$ cette opération n'a aucun effet pour les bosons, mais introduit un changement de signe pour les fermions (anticommutation). Nous obtenons donc pour le terme d'échange le résultat $\eta G_2^{\text{ex}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, avec ⁸ :

$$G_2^{\text{ex}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i \neq j} n_i n_j [u_i^*(\mathbf{r}_1) u_j^*(\mathbf{r}_2) u_i(\mathbf{r}_2) u_j(\mathbf{r}_1)] \quad (\text{C-33})$$

Pour finir, la fonction de corrélation spatiale (densité double) $G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ est donnée par la somme des termes direct et d'échange :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = G_2^{\text{dir}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \eta G_2^{\text{ex}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (\text{C-34})$$

8. La notation traditionnelle ex pour le terme d'échange vient du mot anglais "exchange".

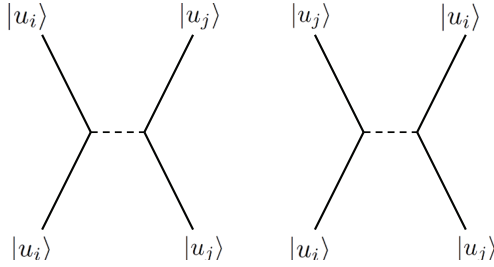


FIGURE 3 – Schématisation d'un terme direct (diagramme de gauche, où chaque particule reste dans le même état individuel) et d'un terme d'échange (diagramme de droite, où les particules échangent leurs états individuels). Comme dans la Figure 2, les lignes pleines représentent la propagation libre des particules, les lignes tiretées leurs interactions binaires.

où le signe η en facteur dans le terme d'échange vaut $+1$ pour des bosons et -1 pour des fermions. Le terme direct contient uniquement le produit des densités de probabilité $|u_i(\mathbf{r}_1)|^2 |u_j(\mathbf{r}_2)|^2$ associées aux fonctions d'onde individuelles $u_i(\mathbf{r}_1)$ et $u_j(\mathbf{r}_2)$, et s'interprète simplement comme celui correspondant à des particules non corrélées. Il faut cependant lui ajouter le terme d'échange qui a une forme mathématique plus compliquée, et qui traduit l'existence de corrélations introduites spécifiquement par l'indiscernabilité des particules (symétrisation ou antisymétrisation du vecteur d'état), même en l'absence totale d'interactions entre les particules. On donne parfois à ces corrélations le nom de “corrélations statistiques” ; dans le Complément A_{XVI} nous donnons une étude plus détaillée de leur dépendance spatiale.

Conclusion

Les opérateurs de création et d'annihilation qui ont été introduits dans ce chapitre conduisent à des expressions concises et générales des opérateurs agissant sur un nombre N de particules quelconque, expressions d'où a totalement disparu la notion de numérotation des particules, mais où apparaissent les nombres d'occupation des états individuels. Ceci simplifie considérablement les calculs effectués sur les “systèmes à N corps”, constitués de N bosons ou fermions identiques en interaction. L'introduction d'approximations, comme par exemple l'approximation du champ moyen utilisée dans la méthode de Hartree-Fock (Complément D_{XV}) est également plus aisée.

Nous avons montré l'équivalence parfaite entre cette approche et celle où l'on tient compte explicitement de l'effet des permutations entre particules numérotées. Etablir précisément un tel lien est important dans l'étude d'un certain nombre de problèmes physiques. Malgré la puissance du formalisme des opérateurs de création et d'annihilation, il s'avère en effet parfois utile, voire indispensable, de conserver la numérotation des particules. C'est souvent le cas pour les calculs numériques, car les ordinateurs sont bien adaptés à calculer des nombres, ou des fonctions ordinaires ; dans ces dernières, il faut bien numéroter les particules, quitte à symétriser ou antisymétriser ensuite.

Dans ce chapitre, nous n'avons considéré que des opérateurs de création et

d'annihilation repérés par des indices discrets – c'est une conséquence du fait que nous avons utilisé uniquement des bases discrètes $\{|u_i\rangle\}$ ou $\{|v_j\rangle\}$ pour les états individuels. Mais d'autres bases peuvent bien sûr être utilisées, comme la base $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ des états propres de la position pour une particule sans spin ; les opérateurs de création et d'annihilation dépendent alors d'un indice continu \mathbf{r} . Apparaissent ainsi des champs d'opérateurs définis en chaque point de l'espace, qui sont appelés "opérateurs champ" et sont étudiés dans le chapitre suivant.

COMPLÉMENTS DU CHAPITRE XV

A_{XV} : PARTICULES ET TROUS

Dans un gaz parfait de fermions, on peut définir des opérateurs de création et d'annihilation de trous (absence de particule) qui permettent, par action sur l'état fondamental, de construire des états excités. Cette notion est importante en physique de la matière condensée. Facile, constitue en quelque sorte un préliminaire au Complément E_{XV}.

B_{XV} : GAZ PARFAIT EN ÉQUILIBRE THERMIQUE; FONCTIONS DE DISTRIBUTION QUANTIQUES

On étudie l'équilibre thermique du gaz parfait de fermions ou de bosons, et l'on introduit les fonctions de distributions qui caractérisent les propriétés physiques d'une particule ou d'une paire de particules. Ces fonctions de distributions sont utilisées dans plusieurs autres compléments, en particulier G_{XV} et H_{XV}. Pour des bosons, on introduit la condensation de Bose-Einstein. L'équation d'état est discutée pour les deux types de particules.

Voir la suite de la liste des compléments page suivante

Série de quatre compléments discutant le comportement de particules en interaction en termes de champ moyen créé par toutes les autres. Important car l'utilisation du champ moyen couvre des pans entiers de la physique et de la chimie.

C_{XV} : SYSTÈME DE BOSONS CONDENSÉS, ÉQUATION DE GROSS-PITAEVSKII

C_{XV} : Ce complément montre comment une méthode variationnelle permet d'étudier l'état fondamental d'un système de bosons en interaction. Le système est décrit par une fonction d'onde à une particule, dans laquelle toutes les particules du système s'accumulent. Cette fonction d'onde obéit à l'équation de Gross-Pitaevskii.

D_{XV} : ÉQUATION DE GROSS-PITAEVSKII DÉPENDANT DU TEMPS

D_{XV} : Ce complément généralise le précédent au cas où la fonction d'onde de Gross-Pitaevskii dépend du temps, ce qui permet d'obtenir le spectre des excitations (spectre de Bogolubov) et de discuter la métastabilité des écoulements (superfluidité).

E_{XV} : SYSTÈME DE FERMIONS, APPROXIMATION DE HARTREE-FOCK

E_{XV} : Un ensemble de fermions en interaction peut être traité par une méthode variationnelle : l'approximation de Hartree-Fock, qui joue un rôle essentiel en physique atomique, moléculaire, et du solide. Dans cette approximation, les interactions de chaque particule avec toutes les autres sont remplacées par un champ moyen créé par ces autres particules; les corrélations introduites par les interactions sont donc ignorées, mais l'indiscernabilité des fermions est traitée de façon exacte. On obtient ainsi les niveaux d'énergie du système physique dans une approximation qui s'avère souvent satisfaisante.

F_{XV} : FERMIONS, APPROXIMATION DE HARTREE-FOCK DÉPENDANT DU TEMPS

F_{XV} : Il arrive souvent que l'on ait à étudier un ensemble de fermions dans un problème dépendant du temps, par exemple les électrons d'une molécule ou d'un solide soumis à un champ électrique oscillant. Or la méthode du champ moyen de Hartree-Fock s'applique également à des problèmes dépendant du temps. On obtient alors un ensemble d'équations d'évolution couplées qui font intervenir un potentiel moyen de Hartree-Fock, très semblable à celui qui intervient pour les problèmes indépendants du temps.

Voir la suite de la liste des compléments page suivante

L'approximation du champ moyen s'applique également à l'étude des propriétés à l'équilibre thermique des systèmes de fermions ou de bosons en interaction. La méthode variationnelle revient à optimiser l'opérateur densité réduit à une particule. Elle permet de généraliser un certain nombre de résultats relatifs au gaz parfait (Complément B_{XV}) au cas où les particules interagissent.

G_{XV} : FERMIONS OU BOSONS : ÉQUILIBRE THERMODYNAMIQUE EN CHAMP MOYEN

G_{XV} : Les calculs variationnels permettent d'optimiser l'opérateur densité d'essai à température non nulle, et d'obtenir des équations de Hartree-Fock auto-cohérentes qui sont du même type que celles obtenues au Complément E_{XV}. On obtient ainsi une valeur approchée du potentiel thermodynamique

H_{XV} : APPLICATIONS DE LA MÉTHODE DU CHAMP MOYEN A TEMPÉRATURE NON NULLE (FERMIONS ET BOSONS)

H_{XV} : Ce complément discute diverses applications de la méthode exposée au complément précédent : magnétisme spontané d'un ensemble de fermions répulsifs, équation d'état de bosons et instabilité en présence d'interactions attractives.

Complément A_{XV}

Particules et trous

1	Etat fondamental d'un gaz de fermions sans interactions	33
2	Nouvelle définition des opérateurs de création et d'annihilation	34
3	Video d'excitations	35

L'utilisation des opérateurs de création et d'annihilation est fréquente en physique du solide, où la notion de particule et de trou joue un rôle important. C'est particulièrement le cas dans l'étude des métaux et des semi-conducteurs où l'on parle, par exemple, de paire électron-trou créée par absorption d'un photon. Un trou désigne une absence de particule, qui a cependant des propriétés semblables aux particules elles-mêmes, comme une masse, une impulsion ou une énergie ; les trous obéissent à la même statistique de fermions que les électrons qu'ils remplacent. L'utilisation des opérateurs de création et d'annihilation permet de mieux comprendre comment se justifie cette notion de trou ; nous le ferons dans le cadre simple d'un gaz de particules libres et sans interactions, mais les idées sont généralisables au cas de particules soumises à un potentiel extérieur ou un potentiel moyen de Hartree-Fock (Complément E_{XV}).

1. Etat fondamental d'un gaz de fermions sans interactions

Considérons donc un système de fermions sans interactions dans leur état fondamental ; pour simplifier nous les supposons tous dans le même état de spin, ce qui nous permettra de ne pas tenir compte de l'indice de spin (mais la généralisation à plusieurs états de spin ne pose aucun problème particulier). Comme nous l'avons vu dans le Complément C_{XIV}, ce système est décrit dans son niveau fondamental par un état où les nombres d'occupation des états individuels d'énergie inférieure à l'énergie de Fermi E_F sont égaux à 1, tous les autres états individuels étant vides. Dans l'espace des impulsions, sont donc occupés tous les états individuels dont le vecteur d'onde \mathbf{k} est contenu dans une sphère (dite "sphère de Fermi") de rayon k_F (dit "rayon de Fermi") donné par¹ :

$$\frac{\hbar^2 (k_F)^2}{2m} = E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{6\pi^2 N}{L^3} \right]^{2/3} \quad (1)$$

avec les notations de la formule (7) du Complément C_{XIV} : l'énergie E_F est l'énergie de Fermi (proportionnelle à la densité des particules à la puissance 2/3), et L la dimension du cube dans lequel sont contenues les particules. Lorsque le système

1. Dans le Complément C_{XIV} nous avons supposé que les deux états de spin d'un gaz d'électrons étaient occupés, alors qu'ici ce n'est pas le cas. C'est pourquoi le crochet de la formule (1) contient un coefficient $6\pi^2 N$ au lieu de $3\pi^2 N$.

est dans l'état fondamental, tous les états individuels à l'intérieur de la sphère de Fermi sont occupés, alors qu'inversement tous les états à l'extérieur sont vides. Lorsqu'on prend comme base $\{|u_i\rangle\}$ celle des ondes planes, notée ici $\{|u_{\mathbf{k}_i}\rangle\}$ en faisant apparaître le vecteur d'onde \mathbf{k}_i , les nombres d'occupation sont :

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{k}_i} &= 1 & \text{si } |\mathbf{k}_i| \leq k_F \\ n_{\mathbf{k}_i} &= 0 & \text{si } |\mathbf{k}_i| > k_F \end{aligned} \quad (2)$$

Dans un système macroscopique, le nombre d'états occupés est très grand, de l'ordre du nombre d'Avogadro ($\simeq 10^{23}$). L'état fondamental a pour énergie :

$$E_0 = \sum_{|\mathbf{k}_i| \leq k_F} e_{\mathbf{k}_i} \quad (3)$$

avec :

$$e_{\mathbf{k}_i} = \frac{\hbar^2 (k_i)^2}{2m} \quad (4)$$

La somme sur les \mathbf{k}_i dans (3) doit être interprétée comme une somme sur toutes les valeurs de \mathbf{k}_i compatibles avec les conditions aux limites dans la boîte de volume L^3 , restreintes à celles pour lesquelles la longueur du vecteur \mathbf{k}_i est plus petite ou égale à k_F .

2. Nouvelle définition des opérateurs de création et d'annihilation

Nous allons considérer cet état fondamental comme un nouveau "vide" $|\widetilde{0}\rangle$ et introduire des opérateurs de création qui, agissant sur ce vide, créent des états excités du système. Pour cela nous poserons :

$$\begin{aligned} \text{si } |\mathbf{k}_i| \leq k_F & \begin{cases} b_{\mathbf{k}_i}^\dagger = a_{\mathbf{k}_i} \\ b_{\mathbf{k}_i} = a_{\mathbf{k}_i}^\dagger \end{cases} \\ \text{si } |\mathbf{k}_i| > k_F & \begin{cases} c_{\mathbf{k}_i} = a_{\mathbf{k}_i} \\ c_{\mathbf{k}_i}^\dagger = a_{\mathbf{k}_i}^\dagger \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

Hors de la sphère de Fermi, les nouveaux opérateurs $c_{\mathbf{k}_i}^\dagger$ et $c_{\mathbf{k}_i}$ sont donc de simples opérateurs de création, ou d'annihilation, d'une particule dans un état d'impulsion qui n'est pas peuplé dans l'état fondamental. A l'intérieur de la sphère de Fermi, les actions sont juste le contraire : l'opérateur $b_{\mathbf{k}_i}^\dagger$ crée une vacance (absence) de particule, que nous appellerons "trou"; l'opérateur adjoint $b_{\mathbf{k}_i}$ repeuple le niveau, détruisant ainsi le trou. On vérifie facilement que les relations d'anticommutation des nouveaux opérateurs sont :

$$\begin{aligned} \left[b_{\mathbf{k}_i}, b_{\mathbf{k}_j} \right]_+ &= \left[b_{\mathbf{k}_i}^\dagger, b_{\mathbf{k}_j}^\dagger \right]_+ = 0 \\ \left[b_{\mathbf{k}_i}, b_{\mathbf{k}_j}^\dagger \right]_+ &= \delta_{\mathbf{k}_i \mathbf{k}_j} \end{aligned} \quad (6)$$

ainsi que :

$$\begin{aligned} \left[c_{\mathbf{k}_i}, c_{\mathbf{k}_j} \right]_+ &= \left[c_{\mathbf{k}_i}^\dagger, c_{\mathbf{k}_j}^\dagger \right]_+ = 0 \\ \left[c_{\mathbf{k}_i}, c_{\mathbf{k}_j}^\dagger \right]_+ &= \delta_{\mathbf{k}_i \mathbf{k}_j} \end{aligned} \quad (7)$$

qui sont celles de particules fermioniques ordinaires. De plus, on obtient les relations d'anticommutation croisées :

$$\left[c_{\mathbf{k}_i}, b_{\mathbf{k}_j}^\dagger \right]_+ = \left[c_{\mathbf{k}_i}^\dagger, b_{\mathbf{k}_j} \right]_+ = \left[c_{\mathbf{k}_i}, b_{\mathbf{k}_j} \right]_+ = \left[c_{\mathbf{k}_i}^\dagger, b_{\mathbf{k}_j}^\dagger \right]_+ = 0 \quad (8)$$

3. Vide d'excitations

Supposons par exemple que, dans ce point de vue, nous appliquions un opérateur d'annihilation $b_{\mathbf{k}_i}$ avec $|\mathbf{k}_i| \leq k_F$ au “nouveau vide” $|\widetilde{0}\rangle$, ce qui doit donner zéro puisqu'on ne peut pas annihiler un trou qui n'existe pas. Dans l'ancien point de vue cela revient, selon (5), à appliquer l'opérateur de création $a_{\mathbf{k}_i}^\dagger$ à un état du système où l'état individuel $|\mathbf{k}_i\rangle$ est déjà peuplé, de sorte que le résultat est bien zéro comme il se doit. En revanche, l'application de l'opérateur de création $b_{\mathbf{k}_i}^\dagger$ avec $|\mathbf{k}_i| \leq k_F$ ne donne pas zéro puisque, dans l'ancien point de vue, elle détruit une particule dans un état qui est déjà peuplé, alors qu'elle crée un trou qui n'existait pas dans le second point de vue. Les deux approches sont donc cohérentes.

Au lieu de parler de particules et de trous, on peut également parler d'excitations ou de “quasi-particules”. L'opérateur de création d'une excitation de $|\mathbf{k}_i| \leq k_F$ est celui $b_{\mathbf{k}_i}^\dagger$ de création d'un trou, l'opérateur de création d'une excitation de $|\mathbf{k}_i| > k_F$ celui $a_{\mathbf{k}_i}^\dagger$ de création d'une particule. Le vide initial est le vecteur propre commun à tous les opérateurs d'annihilation de particules de valeur propre nulle ; de même, le nouveau vide $|\widetilde{0}\rangle$ apparaît comme un vecteur propre commun de valeur propre nulle de tous les opérateurs d'annihilation d'excitations. C'est le “vide de quasi-particules”.

Compte tenu du fait que nous avons laissé de côté les interactions entre particules, l'hamiltonien du système s'écrit :

$$\widehat{H} = \sum_{\mathbf{k}_i} e_{\mathbf{k}_i} n_{\mathbf{k}_i} = \sum_{\mathbf{k}_i} e_{\mathbf{k}_i} a_{\mathbf{k}_i}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} = \sum_{|\mathbf{k}_i| \leq k_F} e_{\mathbf{k}_i} b_{\mathbf{k}_i} b_{\mathbf{k}_i}^\dagger + \sum_{|\mathbf{k}_i| > k_F} e_{\mathbf{k}_i} c_{\mathbf{k}_i}^\dagger c_{\mathbf{k}_i} \quad (9)$$

soit encore, compte tenu des relations d'anticommutation entre opérateurs $b_{\mathbf{k}_i}$ et $b_{\mathbf{k}_i}^\dagger$:

$$\widehat{H} - E_0 = - \sum_{|\mathbf{k}_i| \leq k_F} e_{\mathbf{k}_i} b_{\mathbf{k}_i}^\dagger b_{\mathbf{k}_i} + \sum_{|\mathbf{k}_i| > k_F} e_{\mathbf{k}_i} c_{\mathbf{k}_i}^\dagger c_{\mathbf{k}_i} \quad (10)$$

où E_0 a été défini en (3) ; cette énergie introduit un simple décalage de l'origine de toutes les énergies du système. On voit alors sur (10) que les trous (excitations de $|\mathbf{k}_i| \leq k_F$) ont une énergie négative, ce qui traduit le fait qu'ils correspondent à des particules manquantes. Pour augmenter l'énergie du système à partir de son état fondamental à nombre total de particules constant, on lui applique l'opérateur $b_{\mathbf{k}_i}^\dagger c_{\mathbf{k}_j}^\dagger$ qui crée à la fois une particule et un trou, et augmente l'énergie du système de la quantité $e_j - e_i$; inversement, pour diminuer l'énergie, on appliquera l'opérateur adjoint $c_{\mathbf{k}_j} b_{\mathbf{k}_i}$.

Remarques :

- (i) Nous avons discuté la notion de trou dans le contexte de particules libres, mais rien dans le raisonnement précédent n'impose que le spectre d'énergie à une particule

soit celui de (4), simplement quadratique. En physique des semi-conducteurs par exemple, on considère souvent des cas où les particules se déplacent dans un potentiel périodique, et où elles occupent des états appartenant à la “bande de valence” lorsque leur énergie est inférieure au niveau de Fermi E_F , alors que les autres vont dans la “bande de conduction”, séparée de la précédente par une énergie dite de “gap”. L’envoi d’un photon d’énergie supérieure à ce gap permet alors de créer une “paire électron-trou”, qui se traite bien dans le formalisme proposé ici.

Un cas un peu semblable se produit dans le cadre de l’équation d’onde relativiste de Dirac, qui fait apparaître deux continuums d’énergie : celui des énergies supérieures à l’énergie au repos mc^2 (où m est la masse de l’électron, et c la vitesse de la lumière), qui concerne un électron, et celui des énergies négatives inférieures à $-mc^2$, qui est associé au positron (anti-particule de l’électron, de charge opposée). Le spectre d’énergie est relativiste, et diffère donc de celui de la formule (4), même à l’intérieur de chacun de ces deux continuums. Les idées générales ci-dessus restent cependant valables, les opérateurs $b_{\mathbf{k}_i}^\dagger$ et $b_{\mathbf{k}_i}$ décrivant maintenant respectivement la création et l’annihilation d’un positron. L’équation de Dirac conduit cependant à des problèmes, en particulier ceux liés à l’infinité d’états d’énergie négative qu’elle introduit, qu’il faut supposer occupés pour éviter des difficultés ; il faut alors recourir à la théorie quantique des champs pour obtenir un traitement plus satisfaisant de ce type de problème relativiste.

(ii) Un état de Fock quelconque $|\Phi\rangle$ à N particules n’a pas besoin d’être l’état fondamental pour, formellement, être considéré comme un “vide de quasiparticules”. Il suffit pour cela de considérer comme opérateur de création d’un trou (une excitation) tout opérateur d’annihilation dans un état individuel qui est déjà occupé dans l’état de Fock, et de redéfinir en conséquence les opérateurs d’annihilation. $|\Phi\rangle$ apparaît alors comme vecteur propre de valeur propre nulle commun à tous les opérateurs d’annihilation. Cette manipulation est parfois utile dans le cadre du théorème de Wick (Complément C_{XVI}). Au chapitre XVII, § E, nous verrons un autre exemple de vide de quasi-particules, mais où cette fois les nouveaux opérateurs d’annihilation sont définis, non plus en termes d’états individuels, mais d’états de paires de particules.

Complément B_{XV}

Gaz parfait en équilibre thermique ; fonctions de distribution quantiques

1	Description grand-canonique d'un système sans interactions	38
1-a	Opérateur densité	38
1-b	Fonction de partition grand-canonique, grand-potentiel .	39
2	Valeurs moyennes des opérateurs symétriques à une particule	40
2-a	Fonction de distribution pour des fermions	41
2-b	Fonction de distribution pour des bosons	41
2-c	Expression commune	42
2-d	Propriétés des distributions de Fermi-Dirac et de Bose-Einstein	42
3	Opérateurs à deux particules	44
3-a	Fermions	44
3-b	Bosons	45
3-c	Expression commune	46
4	Nombre total de particules	47
4-a	Fermions	47
4-b	Bosons	49
5	Equation d'état, pression	52
5-a	Fermions	53
5-b	Bosons	53

Ce complément est consacré à l'étude des valeurs moyennes des opérateurs à une ou deux particules pour un gaz parfait, supposé à l'équilibre thermique. Il nous permettra de discuter un certain nombre de propriétés utiles des fonctions de distribution de Fermi-Dirac et de Bose-Einstein, déjà introduites de façon plus sommaire au Chapitre XIV.

Pour décrire un équilibre thermique, on utilise souvent en mécanique statistique l'ensemble grand-canonique où le nombre de particules peut fluctuer, avec une valeur moyenne qui est déterminée par le potentiel chimique μ (cf. Appendice VI, où sont regroupées un certain nombre de notions qui peuvent être utiles pour la lecture de ce complément). Ce dernier joue, vis-à-vis du nombre de particules, un rôle analogue à celui de l'inverse de la température $\beta = 1/k_B T$ vis-à-vis de l'énergie (où k_B est la constante de Boltzmann). En mécanique statistique quantique, l'espace de Fock est particulièrement bien adapté à l'ensemble grand-canonique puisqu'il permet de faire varier aisément le nombre total de particules. De fait, nous allons voir que le calcul des valeurs moyennes des opérateurs symétriques à une ou deux particules avec un système de particules identiques en équilibre thermique fournit une application directe des résultats des §§B et C du Chapitre XV.

Pour des particules sans interactions, après avoir écrit au § 1 l'opérateur densité, nous verrons aux §§ 2 et 3 que les valeurs moyennes des opérateurs symétriques s'expriment complètement à partir des seules fonctions de distribution de Fermi-Dirac et de Bose-Einstein, ce qui élargit encore leur domaine d'application, et donc leur importance. Au § 5, nous étudierons l'équation d'état d'un gaz parfait constitué de fermions ou de bosons à température T et contenu dans un volume \mathcal{V} .

1. Description grand-canonique d'un système sans interactions

Nous commençons par rappeler comment, dans le cadre de la mécanique statistique quantique, on décrit un système de particules sans interactions par l'ensemble grand-canonique ; on trouvera plus de détails sur ce sujet dans l'Appendice VI, § 1-c.

1-a. Opérateur densité

Les relations (42) et (43) de l'Appendice VI fournissent l'opérateur densité ρ_{eq} grand-canonique (de trace normée à l'unité), qui s'écrit :

$$\rho_{eq} = \frac{1}{Z} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \quad (1)$$

où Z est la fonction de partition grand-canonique :

$$Z = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right\} \quad (2)$$

Dans ces relations, $\beta = 1/(k_B T)$ est l'inverse de la température absolue T multipliée par la constante de Boltzmann k_B , et μ est le potentiel chimique (qui peut être fixé par un grand réservoir de particules). Les opérateurs \hat{H} et \hat{N} sont respectivement l'hamiltonien du système et l'opérateur nombre de particules défini en (B-15) dans le Chapitre XV.

Nous supposons que les particules sont sans interaction. Comme dans l'équation (B-1) du Chapitre XV, l'hamiltonien \hat{H} est alors une somme d'opérateurs à une particule, dans chaque sous-espace où le nombre total de particules est fixé à N :

$$\hat{H} = \sum_{q=1}^N \hat{h}(q) \quad (3)$$

Appelons $\{|u_k\rangle\}$ la base des états individuels qui sont états propres de l'opérateur \hat{h} . Les opérateurs de création et d'annihilation d'une particule dans ces états sont notés a_k^\dagger et a_k , et \hat{H} s'écrit alors comme en (B.14) :

$$\hat{H} = \sum_k e_k a_k^\dagger a_k = \sum_k e_k \hat{n}_k \quad (4)$$

où les e_k sont les valeurs propres de \hat{h} . On peut également écrire l'opérateur (1) sous la forme :

$$\rho_{eq} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \sum_k (e_k - \mu) a_k^\dagger a_k} = Z^{-1} \prod_k e^{-\beta (e_k - \mu) a_k^\dagger a_k} \quad (5)$$

Nous nous proposons de calculer les valeurs moyennes de tous les opérateurs à une ou deux particules pour un système décrit par l'opérateur densité (1).

1-b. Fonction de partition grand-canonique, grand-potentiel

En mécanique statistique, le “grand-potentiel” Φ associé à l’équilibre grand-canonique est défini comme le logarithme (népérien) de la fonction de partition, multiplié par $-k_B T$ (cf. Appendice VI, § 1.c.β) :

$$\Phi = -k_B T \text{Log } Z \quad (6)$$

Ici, Z est donné par (2). La trace figurant dans cette équation s’obtient aisément dans la base des états de Fock engendrée par les états individuels $\{|u_k\rangle\}$. En effet, la trace d’un produit tensoriel d’opérateurs (Chapitre II, § F.2.b) est simplement le produit des traces de chaque opérateur. Or l’espace de Fock a une structure de produit tensoriel des espaces associés à chacun des $|u_k\rangle$ (et engendrés individuellement par les kets où la population n_k varie de zéro à l’infini ; cf. la remarque (i) du § A-1-c du Chapitre XV) ; il suffit donc de calculer un produit de traces dans chacun de ces espaces. Pour k donné nous sommes donc les éléments diagonaux sur toutes les valeurs des n_k , puis nous prenons ensuite le produit sur k , ce qui conduit à :

$$Z = \prod_k \sum_{n_k} \exp[-\beta n_k (e_k - \mu)] \quad (7)$$

α. Fermions

Pour des fermions, n_k ne prend que les valeurs 0 ou 1 (deux fermions identiques ne peuvent jamais occuper le même état individuel). On obtient donc :

$$Z_{\text{fermions}} = \prod_k \left[1 + e^{-\beta(e_k - \mu)} \right] \quad (8)$$

et :

$$\Phi_{\text{fermions}} = -k_B T \sum_k \text{Log} \left[1 + e^{-\beta(e_k - \mu)} \right] \quad (9)$$

La somme sur k est une somme sur tous les états individuels. Si ces derniers sont repérés par un indice orbital et un indice de spin, il faut sommer sur ces deux indices. Considérons par exemple des particules de spin S contenues dans une boîte de volume \mathcal{V} avec des conditions aux limites périodiques ; les états stationnaires individuels s’écrivent alors $|\mathbf{k}, \nu\rangle$, où \mathbf{k} satisfait aux conditions aux limites périodiques (Complément C_{XIV}, § 1.c) et où l’indice ν prend $(2S + 1)$ valeurs. Si nous supposons les particules libres dans la boîte (pas d’hamiltonien de spin), chaque valeur de ν apporte la même contribution à Φ_{fermions} ; à la limite des grands volumes, l’expression (9) devient alors :

$$\Phi_{\text{fermions}} = -(2S + 1) k_B T \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3k \text{Log} \left[1 + e^{-\beta(e_k - \mu)} \right] \quad (10)$$

β. Bosons

Pour des bosons, la somme sur n_k dans (7) court de $n_k = 0$ à l’infini, ce qui introduit une série géométrique aisément sommable. On obtient :

$$Z_{\text{bosons}} = \prod_k \frac{1}{1 - e^{-\beta(e_k - \mu)}} \quad (11)$$

soit :

$$\Phi_{\text{bosons}} = k_B T \sum_k \text{Log} \left[1 - e^{-\beta(e_k - \mu)} \right] \quad (12)$$

Si le système est constitué de particules libres, de spin S et contenues dans une boîte avec les conditions aux limites périodiques, à la limite des grands volumes on obtient :

$$\Phi_{\text{bosons}} = (2S + 1) k_B T \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3k \text{Log} \left[1 - e^{-\beta(e_k - \mu)} \right] \quad (13)$$

De façon générale, et pour des fermions comme pour des bosons, le grand-potentiel donne directement la pression P , comme l'indique la relation (60) de l'Appendice VI :

$$\Phi = -P\mathcal{V} \quad (14)$$

Grâce à des dérivations appropriées par rapport aux paramètres déterminant l'équilibre (température, potentiel chimique, volume), il donne également les autres grandeurs thermodynamiques telles qu'énergie, chaleurs spécifiques, etc.

2. Valeurs moyennes des opérateurs symétriques à une particule

Nous avons introduit de façon générale au Chapitre XV (§§ B et C) des opérateurs quantiques symétriques, à une seule particule en premier lieu, puis à deux particules ; l'expression générale d'un opérateur \hat{F} à une particule est donnée par l'équation (B-12) de ce chapitre. On a donc :

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_{i,j} \langle u_i | \hat{F} | u_j \rangle \langle a_i^\dagger a_j \rangle \quad (15)$$

avec, lorsque l'état du système est donné par l'opérateur densité (1) :

$$\langle a_i^\dagger a_j \rangle = \text{Tr} \left\{ \rho_{eq} a_i^\dagger a_j \right\} = Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} a_i^\dagger a_j \right\} \quad (16)$$

Calculons cette trace dans la base des états de Fock $|n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle$ associés à la base des états propres $\{|u_k\rangle\}$ de \hat{h} . Si $i \neq j$, l'opérateur $a_i^\dagger a_j$ détruit une particule dans l'état individuel $|u_j\rangle$ et en crée une dans l'état différent $|u_i\rangle$; il transforme donc l'état de Fock $|n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle$ en un autre état de Fock $|n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots\rangle$ orthogonal ; l'opérateur ρ_{eq} agit ensuite, et multiplie ce ket par une constante. Donc, si $i \neq j$, tous les éléments diagonaux de l'opérateur dont (16) prend la trace sont nuls ; la trace est donc également nulle. Si $i = j$, cette valeur moyenne se calcule comme la fonction de partition, grâce au fait que l'espace de Fock a une structure de produit tensoriel d'espaces relatifs aux états individuels. La trace est le produit de la contribution de la valeur i par toutes les autres valeurs k . Donc, de façon générale :

$$\langle a_i^\dagger a_j \rangle = \delta_{ij} Z^{-1} \left\{ \sum_{n_i} n_i \exp[-\beta n_i (e_i - \mu)] \right\} \times \prod_{k \neq i} \left\{ \sum_{n_k} \exp[-\beta n_k (e_k - \mu)] \right\} \quad (17)$$

Lorsque $i = j$, cette expression est celle du nombre moyen de particules dans l'état individuel $|u_i\rangle$.

2-a. Fonction de distribution pour des fermions

Les nombres d'occupation ne prenant que les valeurs 0 et 1, la première accolade de l'expression (17) est égale à $[e^{-\beta(e_i-\mu)}]$; pour la contribution des autres modes $k \neq i$ dans la seconde accolade, elle est identique à celle qui entre dans la fonction de partition, déjà calculée. On obtient donc :

$$\langle a_i^\dagger a_j \rangle = \delta_{ij} Z^{-1} [e^{-\beta(e_i-\mu)}] \times \prod_{k \neq i} [1 + e^{-\beta(e_k-\mu)}] \quad (18)$$

Nous pouvons multiplier haut et bas par $1 + e^{-\beta(e_i-\mu)}$, ce qui permet de reconstruire Z dans le produit infini, et de simplifier ensuite par Z ; il vient alors :

$$\langle a_i^\dagger a_j \rangle = \delta_{ij} \frac{e^{-\beta(e_i-\mu)}}{1 + e^{-\beta(e_i-\mu)}} = \delta_{ij} f_\beta^{FD}(e_i - \mu) \quad (19)$$

où l'on retrouve la fonction de distribution de Fermi-Dirac f_β^{FD} (Complément C_{XIV}, § 1.b) :

$$f_\beta^{FD}(e - \mu) = \frac{e^{-\beta(e-\mu)}}{1 + e^{-\beta(e-\mu)}} = \frac{1}{e^{\beta(e-\mu)} + 1} \quad (20)$$

Cette fonction de distribution donne la population moyenne de chaque état individuel $|u_i\rangle$; c'est toujours un nombre plus petit que 1, comme nécessaire pour des fermions.

Il suffit alors de reporter (19) dans (15) pour obtenir la valeur moyenne à l'équilibre thermique de tout opérateur à une particule.

2-b. Fonction de distribution pour des bosons

La contribution du mode $j = i$ est :

$$\begin{aligned} \sum_{n_i=0}^{\infty} n_i \exp[-\beta n_i (e_i - \mu)] &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{n_i=0}^{\infty} \exp[-\beta n_i (e_i - \mu)] \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{1}{1 - \exp[-\beta (e_i - \mu)]} \end{aligned} \quad (21)$$

Il vient donc :

$$\langle a_i^\dagger a_j \rangle = \frac{\delta_{i,j}}{Z} \frac{e^{-\beta(e_i-\mu)}}{[1 - e^{-\beta(e_i-\mu)}]^2} \times \prod_{k \neq i} \frac{1}{1 - e^{-\beta(e_k-\mu)}} \quad (22)$$

soit finalement, compte tenu de (11) :

$$\langle a_i^\dagger a_j \rangle = \delta_{ij} f_\beta^{BE}(e_i - \mu) \quad (23)$$

où la fonction de distribution de Bose-Einstein f_β^{BE} est définie par :

$$f_\beta^{BE}(e - \mu) = \frac{e^{-\beta(e-\mu)}}{1 - e^{-\beta(e-\mu)}} = \frac{1}{e^{\beta(e-\mu)} - 1} \quad (24)$$

Cette fonction de distribution donne la population moyenne de l'état individuel $|u_i\rangle$, qui pour des bosons n'a pas d'autre contrainte que d'être positive. Le potentiel

chimique est toujours inférieur à l'énergie individuelle e_k la plus basse ; si cette dernière est nulle, μ doit toujours être négatif. Ceci évite toute divergence de la fonction f_β^{BE} .

Pour des bosons, on reporte donc (23) dans (15) pour obtenir la valeur moyenne de tout opérateur à une particule.

2-c. Expression commune

Définissons la fonction f_β comme, soit la fonction f_β^{FD} pour des fermions, soit la fonction f_β^{BE} pour des bosons. On a alors, dans les deux cas :

$$f_\beta(e - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(e-\mu)} - \eta} \quad (25)$$

où le nombre η est défini par :

$$\begin{aligned} \eta &= -1 \text{ pour des fermions} \\ \eta &= +1 \text{ pour des bosons} \end{aligned} \quad (26)$$

2-d. Propriétés des distributions de Fermi-Dirac et de Bose-Einstein

Nous avons déjà donné au Complément C_{XIV} (Figure 3) l'allure de la distribution de Fermi-Dirac. La Figure 1 montre les variations de cette distribution et de celle de Bose-Einstein. Pour comparaison, elle indique également les variations de la distribution classique de Boltzmann :

$$f_\beta^{\text{Boltzmann}}(e - \mu) = e^{-\beta(e-\mu)} \quad (27)$$

qui prend des valeurs intermédiaires entre les deux précédentes.

Pour un gaz sans interaction contenu dans une boîte avec les conditions aux limites périodiques, l'énergie e la plus basse possible est nulle, et toutes les autres énergies sont positives. L'exponentielle $e^{\beta(e_i - \mu)}$ est donc toujours supérieure à $e^{-\beta\mu}$. Nous allons alors distinguer plusieurs cas, en commençant par les valeurs les plus négatives du potentiel chimique.

(i) Si $\beta\mu$ est négatif avec un module grand devant 1 (c'est-à-dire si μ est très négatif, donc $\mu \ll -k_B T$, ce qui correspond à la droite de la figure), l'exponentielle au dénominateur de (25) est toujours très grande devant 1 (quelle que soit l'énergie e), de sorte que la distribution se réduit alors à la distribution de Boltzmann classique (27). Dans ce cas, les distributions sont pratiquement les mêmes pour bosons et fermions ; on dit que le gaz est "non dégénéré".

(ii) Pour un système de fermions, le potentiel chimique n'a pas de limite supérieure, mais la population d'un état individuel ne peut jamais dépasser 1. Si μ est positif avec $\beta\mu \gg 1$:

– pour les faibles valeurs de l'énergie, c'est maintenant le terme en 1 qui domine devant l'exponentielle ; la population de chaque état individuel est alors presque égale à sa valeur maximale 1.

– si l'énergie e_i croît à des valeurs comparables à μ , cette population diminue ; lorsque $e_i \gg \mu$, elle devient pratiquement égale à ce que prédit l'exponentielle de Boltzmann (27).

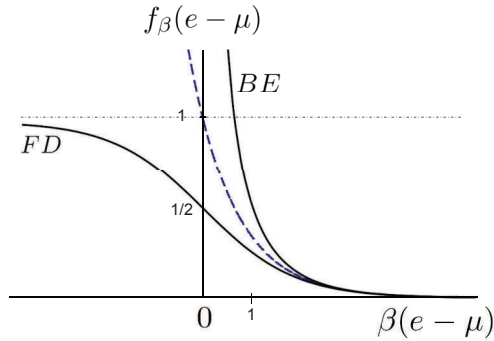


FIGURE 1 – Variations des distributions quantiques de Fermi-Dirac f_{β}^{FD} (pour des fermions, courbe du bas) et de Bose-Einstein f_{β}^{BE} (pour des bosons, courbe du haut) en fonction de la variable sans dimension $\beta(e - \mu)$; la courbe intermédiaire en tiretés représente la distribution classique de Boltzmann $e^{-\beta(e-\mu)}$. Dans la partie droite de la figure où μ prend de grandes valeurs négatives, le nombre de particules est faible (région des faibles densités), et les deux distributions se confondent pratiquement avec la distribution de Boltzmann ; on dit que le système est non dégénéré, ou classique. Lorsque μ augmente, on atteint les régions centrale ou de gauche de la figure, et les distributions commencent à différer de plus en plus, ce qui traduit l'apparition progressive d'une dégénérescence dans le gaz. Pour des bosons, μ ne peut passer au-dessus de la valeur e_0 de l'énergie de l'état fondamental à une particule, supposée ici nulle ; la divergence pour cette valeur $\mu = 0$ correspond à la condensation de Bose-Einstein. Pour des fermions, aucune limite n'existe pour μ et, lorsque le potentiel chimique augmente, la fonction de distribution tend vers 1 pour toute valeur de l'énergie (elle ne peut jamais dépasser 1 à cause du principe d'exclusion de Pauli).

La plupart des particules occupent cependant les états individuels d'énergie inférieure ou comparable à μ , dont la population est proche de 1. On dit que le système de fermions est "dégénéré".

(iii) Pour un système de bosons, le potentiel chimique ne peut dépasser la plus petite valeur e_0 de toutes les énergies individuelles, que nous avons supposée nulle. Lorsque μ approche de zéro par valeurs négatives et que $-1 \ll \beta\mu < 0$, pour les faibles valeurs de l'énergie le dénominateur de la fonction de distribution s'annule presque, de sorte que la population des états correspondants peut devenir très importante. On dit alors que le gaz de bosons est "dégénéré". En revanche, pour les énergies comparables ou supérieures à μ , comme pour les fermions on retrouve pratiquement la distribution de Boltzmann.

(iv) Enfin, dans les situations intermédiaires entre les cas extrêmes précédents, on dit que le gaz est "partiellement dégénéré".

3. Opérateurs à deux particules

Pour un opérateur symétrique \widehat{G} à deux particules, il nous faut utiliser la formule (C-16) du Chapitre XV, qui donne :

$$\langle \widehat{G} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle 1 : u_i; 2 : u_j | \widehat{g}(1,2) | 1 : u_k; 2 : u_l \rangle \langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \rangle \quad (28)$$

avec :

$$\langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(\widehat{H} - \mu \widehat{N})} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \right\} \quad (29)$$

Comme l'opérateur exponentiel dans la trace est diagonal dans la base des états de Fock $|n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle$, cette trace est non nulle à la double condition que les états i et j associés aux opérateurs de création soient exactement les mêmes que les états k et l associés aux opérateurs d'annihilation, dans un ordre ou dans l'autre. En d'autres termes, pour que la trace soit non nulle il faut que, soit $i = l$ et $j = k$, soit $i = k$ et $j = l$, soit les deux égalités.

3-a. Fermions

Deux fermions ne pouvant occuper le même état quantique, le produit $a_i^\dagger a_j^\dagger$ est nul si $i = j$; nous supposons donc que $i \neq j$ ce qui, compte tenu de l'expression (5) de ρ_{eq} (qui est un produit), permet d'effectuer des calculs indépendants pour les divers modes. Le cas $i = l$ et $j = k$ fournit, compte tenu des relations d'anticommutation :

$$a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j = - \left(a_i^\dagger a_i \right) \left(a_j^\dagger a_j \right) \quad (30)$$

tandis que le cas $i = k$ et $j = l$ fournit :

$$a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i = + \left(a_i^\dagger a_i \right) \left(a_j^\dagger a_j \right) \quad (31)$$

Prenons d'abord le terme (30). Comme i et j sont différents, les opérateurs $a_i^\dagger a_i$ et $a_j^\dagger a_j$ agissent sur des modes distincts, qui sont factorisés dans l'opérateur densité (5). La valeur moyenne du produit est donc simplement un produit des valeurs moyennes :

$$\left\langle \left(a_i^\dagger a_i \right) \left(a_j^\dagger a_j \right) \right\rangle = \left\langle a_i^\dagger a_i \right\rangle \left\langle a_j^\dagger a_j \right\rangle \quad (32)$$

$$= f_\beta^{FD}(e_i - \mu) f_\beta^{FD}(e_j - \mu) \quad (33)$$

Pour le terme (31), il est simplement l'opposé du précédent. Nous obtenons donc pour finir :

$$\left\langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \right\rangle = [\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk}] f_\beta^{FD}(e_i - \mu) f_\beta^{FD}(e_j - \mu) \quad (34)$$

Le premier terme du membre de droite est appelé terme direct, le second terme d'échange; il a un signe moins, comme d'habitude pour des fermions.

3-b. Bosons

Pour des bosons, les opérateurs a commutent entre eux.

$\alpha.$ *Calcul des valeurs moyennes*

Si $i \neq j$, un calcul semblable au précédent fournit :

$$\left\langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_k \right\rangle = [\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}] f_\beta^{BE}(e_i - \mu) f_\beta^{BE}(e_j - \mu) \quad (35)$$

qui présente deux différences par rapport à (34) : c'est maintenant la fonction de Bose-Einstein qui figure dans le résultat, et le terme d'échange est positif.

Si $i = j$, un seul état individuel est concerné par le calcul, et un nouveau calcul est nécessaire. Compte tenu de la forme (5) de ρ_{eq} nous obtenons, en sommant comme en (11) des séries géométriques :

$$\left\langle a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_i \right\rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n_i=0}^{\infty} n_i (n_i - 1) \exp[-\beta n_i (e_i - \mu)] \prod_{k \neq i} \frac{1}{1 - e^{-\beta(e_k - \mu)}} \quad (36)$$

où apparaît la somme :

$$\begin{aligned} \sum_{n_i=0}^{\infty} n_i (n_i - 1) \exp[-\beta n_i (e_i - \mu)] &= \left[\frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \right] \sum_{n_i=0}^{\infty} \exp[-\beta n_i (e_i - \mu)] \\ &= \left[\frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \right] \frac{1}{1 - e^{-\beta(e_i - \mu)}} \end{aligned} \quad (37)$$

Le terme en dérivée première donne :

$$-\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{1}{1 - e^{-\beta(e_i - \mu)}} = \frac{e^{-\beta(e_i - \mu)}}{[1 - e^{-\beta(e_i - \mu)}]^2} \quad (38)$$

et le terme en dérivée seconde :

$$\frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \frac{1}{1 - e^{-\beta(e_i - \mu)}} = -\frac{e^{-\beta(e_i - \mu)}}{[1 - e^{-\beta(e_i - \mu)}]^2} + 2 \frac{[e^{-\beta(e_i - \mu)}]^2}{[1 - e^{-\beta(e_i - \mu)}]^3} \quad (39)$$

La somme de ces deux termes vaut :

$$\frac{2 [e^{-\beta(e_i - \mu)}]^2}{[1 - e^{-\beta(e_i - \mu)}]^3} = \frac{2}{1 - e^{-\beta(e_i - \mu)}} [f_\beta^{BE}(e_i - \mu)]^2 \quad (40)$$

Le produit à la fin du second membre de (36) reconstruit Z si on le multiplie par $1/[1 - e^{-\beta(e_i - \mu)}]$; il se simplifie alors avec le $1/Z$ en début de formule. Il reste pour finir :

$$\left\langle a_i^\dagger a_i^\dagger a_i a_k \right\rangle = 2 \delta_{il} \delta_{ik} [f_\beta^{BE}(e_i - \mu)]^2 \quad (41)$$

Ce résultat montre que (35) reste en fait valable dans le cas $i = j$.

β . *Discussion physique : fluctuations des nombres d'occupation*

Lorsque les deux états physiques i et j sont différents, la valeur moyenne $\langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i \rangle$ pour un gaz parfait est simplement égale au produit des valeurs moyennes $\langle a_i^\dagger a_i \rangle = f_\beta^{BE}(e_i - \mu)$ et $\langle a_j^\dagger a_j \rangle = f_\beta^{BE}(e_j - \mu)$; c'est une conséquence de l'absence totale d'interaction entre les particules. Il en est de même de la valeur moyenne $\langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j \rangle$.

Lorsque $i = j$, on note la présence d'un facteur 2 dans (41). Ce facteur implique la présence de fortes fluctuations associées à l'opérateur \hat{n}_i , nombre de particules dans l'état $|u_i\rangle$. En effet, si l'on calcule l'écart quadratique moyen associé, on obtient :

$$\Delta n_i = \sqrt{\langle (\hat{n}_i)^2 \rangle - \langle \hat{n}_i \rangle^2} = f_\beta^{BE}(e_i - \mu) = \langle \hat{n}_i \rangle \quad (42)$$

Les fluctuations de cet opérateur sont donc égales à sa valeur moyenne, ce qui implique que la population de chaque état $|u_i\rangle$ est nécessairement mal définie à l'équilibre thermique¹. C'est en particulier vrai si $\langle \hat{n}_i \rangle$ est grand : lorsqu'un état individuel de bosons est fortement peuplé dans un gaz parfait, la fluctuation de population associée est également toujours très importante. L'origine de cette fluctuation tient à la forme de la fonction de distribution de Bose-Einstein (24), qui est une exponentielle décroissante maximale à l'origine : le nombre d'occupation le plus probable est toujours $n_i = 0$. Avec une telle exponentielle décroissante, il est impossible d'obtenir une valeur moyenne $\langle \hat{n}_i \rangle$ très grande sans introduire une distribution s'étalant sur un très grand nombre de valeurs de n_i . Nous discuterons au § 4.a du Complément H_{XV} certaines conséquences de ces fluctuations pour un gaz parfait. Nous mentionnerons également que, dès qu'une faible interaction répulsive entre les particules est introduite, les fluctuations diminuent beaucoup et disparaissent presque totalement (leur présence entraînerait une forte augmentation de l'énergie potentielle).

3-c. Expression commune

Pour finir, dans tous les cas nous pouvons écrire :

$$\langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \rangle = [\delta_{ik}\delta_{jl} + \eta \delta_{il}\delta_{jk}] f_\beta(e_i - \mu) f_\beta(e_j - \mu) \quad (43)$$

avec :

$$\begin{cases} \text{pour des fermions} & \eta = -1, & f_\beta = f_\beta^{FD} \\ \text{pour des bosons} & \eta = +1, & f_\beta = f_\beta^{BE} \end{cases} \quad (44)$$

Comme l'indique la relation (C-19) du Chapitre XV, cette valeur moyenne n'est autre que l'élément de matrice $\langle 1 : u_k; 2 : u_l | \hat{\rho}_2 | 1 : u_i; 2 : u_j \rangle$ de l'opérateur densité réduit à deux particules. Pour obtenir l'expression générale de la valeur moyenne d'un opérateur symétrique quelconque à deux particules, il suffit ensuite de reporter (43) dans (28). Ainsi, pour des particules indépendantes, les valeurs moyennes de tous ces opérateurs s'expriment simplement à partir des fonctions de distribution quantiques de Fermi-Dirac et de Bose-Einstein.

1. Une observable physique prend une valeur bien définie dans un état quantique donné si, pour cet état, son écart quadratique moyen est petit par rapport à la valeur absolue de sa valeur moyenne.

Dans le Complément C_{XVI}, nous verrons comment le théorème de Wick permet de généraliser ces résultats à des opérateurs mettant en jeu un nombre quelconque de particules.

4. Nombre total de particules

L'opérateur \widehat{N} correspondant au nombre total de particules est donné par la somme sur tous les états individuels :

$$\widehat{N} = \sum_{i=1}^{\infty} a_i^\dagger a_i \quad (45)$$

dont la valeur moyenne est :

$$\langle \widehat{N} \rangle = \text{Tr} \left\{ \widehat{N} \rho_{eq} \right\} = \sum_{i=1}^{\infty} f_\beta(e_i - \mu) \quad (46)$$

Comme f_β est croissante en fonction de μ , le nombre total de particules est contrôlé (à β donné) par le potentiel chimique.

4-a. Fermions

Pour simplifier, nous allons étudier les propriétés du gaz parfait sans tenir compte du spin, ce qui revient à supposer que toutes les particules occupent le même état de spin (en tenir compte ne présenterait aucune difficulté particulière : il suffirait d'ajouter les contributions des divers états de spin individuels). Si le système physique est grand, ses niveaux d'énergie sont très proches, et l'on peut remplacer la somme discrète de (46) par une intégrale. On obtient alors :

$$\langle \widehat{N} \rangle = N_{gp}^{FD}(\beta, \mu) \quad (47)$$

où la fonction $N_{gp}^{FD}(\beta, \mu)$ est définie par (l'indice *gp* est mis pour "gaz parfait") :

$$N_{gp}^{FD}(\beta, \mu) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{1}{e^{\beta(e_k - \mu)} + 1} \quad (48)$$

La Figure 2 montre l'allure générale des variations de la fonction $N_{gp}^{FD}(\beta, \mu)$ en fonction de μ , lorsque β et le volume \mathcal{V} sont fixés.

Afin de manipuler des quantités sans dimension, on introduit souvent la "longueur d'onde thermique" λ_T par :

$$\lambda_T = \hbar \sqrt{\frac{2\pi}{mk_B T}} = \hbar \sqrt{\frac{2\pi\beta}{m}} \quad (49)$$

On peut alors utiliser dans (48) la variable d'intégration sans dimension :

$$\kappa = \frac{k\lambda_T}{2\sqrt{\pi}} \quad (50)$$

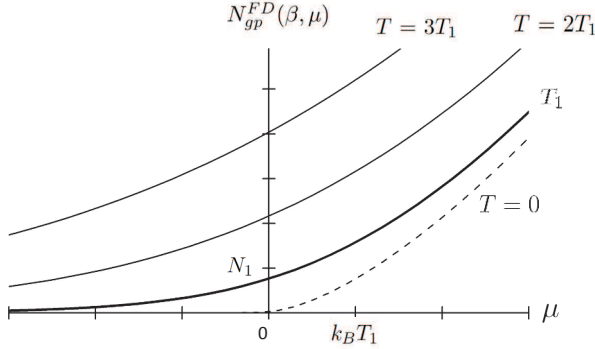


FIGURE 2 – Variations du nombre de particules $N_{gp}^{FD}(\beta, \mu)$ d'un gaz parfait de fermions en fonction du potentiel chimique μ , et à température T fixée ; $\beta = 1/(k_B T)$. La figure montre les courbes obtenues pour plusieurs températures. Pour $T = 0$ (courbe inférieure en tiretés), le nombre de particules est nul lorsque μ est négatif, et proportionnel à $\mu^{3/2}$ lorsque μ est positif. Pour une valeur non nulle de la température $T = T_1$ (courbe en trait épais), la courbe se place au-dessus de la précédente et la densité n'est jamais nulle. La figure montre également les courbes obtenues pour les températures double $T = 2T_1$ et triple $T = 3T_1$. Les unités sur les axes sont l'énergie thermique $k_B T_1$ associée à la courbe en traits épais, ainsi que le nombre de particules $N_1 = \mathcal{V}/(\lambda_{T_1})^3$, où λ_{T_1} est la longueur d'onde thermique à la température T_1 .

La région des valeurs de μ très négatives est la région classique où le gaz de fermions n'est pas dégénéré ; les équations du gaz parfait classique s'appliquent alors avec une bonne approximation. La région où $\mu \gg k_B T$ est celle où le gaz est très dégénéré, de sorte qu'une sphère de Fermi apparaît nettement dans l'espace des impulsions ; le nombre total de particules dépend alors peu de la température, et varie donc approximativement en $\mu^{3/2}$.

Cette figure a aimablement été fournie par Geneviève Tastevin.

et écrire :

$$N_{gp}^{FD}(\beta, \mu) = \frac{\mathcal{V}}{(\lambda_T)^3} I_{3/2}(\beta\mu) \quad (51)$$

avec² :

$$I_{3/2}(\beta\mu) = \pi^{-3/2} \int d^3\kappa \frac{1}{e^{\kappa^2 - \beta\mu} + 1} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{e^{x - \beta\mu} + 1} \quad (52)$$

2. L'indice 3/2 se réfère à celui de fonctions $f_m(z)$, souvent appelées en physique fonctions de Fermi. Elles sont définies par $f_m(z) = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} z^l / l^m$, où z est la "fugacité" $z = e^{\beta\mu}$. Un développement en z de la fonction $1/[1 + z^{-1}e^x] = ze^{-x}/[1 + ze^{-x}]$ et l'utilisation des propriétés de la fonction Gamma d'Euler permettent de montrer que $I_{3/2}(\beta\mu) = f_{3/2}(z)$.

où, dans la seconde égalité on a effectué le changement de variable :

$$x = \kappa^2 \tag{53}$$

La valeur de $I_{3/2}$ ne dépend que d'une variable sans dimension, le produit $\beta\mu$.

Si les particules ont un spin $1/2$, les contributions $\langle \widehat{N}_+ \rangle$ et $\langle \widehat{N}_- \rangle$ des deux états de spin s'ajoutent dans (46) ; si de plus le champ magnétique appliqué au système est nul, les énergies des particules individuelles sont indépendantes de la direction de leur spin, de sorte que le nombre total des particules est simplement doublé :

$$\langle \widehat{N} \rangle = \langle \widehat{N}_+ \rangle + \langle \widehat{N}_- \rangle = 2N_{gp}^{FD}(\beta, \mu) \tag{54}$$

4-b. Bosons

Ici aussi, pour simplifier nous commençons par supposer les particules sans spin, mais l'inclusion de plusieurs états de spin ne poserait aucun problème particulier. Pour des bosons, il faut utiliser la distribution de Bose-Einstein (24) ; leur nombre moyen est donc donné par :

$$\langle \widehat{N} \rangle = \sum_k f_{\beta}^{BE}(e_k - \mu) = \sum_k \frac{1}{e^{\beta(e_k - \mu)} - 1} \tag{55}$$

Nous prenons des conditions aux limites périodiques dans une boîte cubique de côté L ; la valeur la plus faible de l'énergie individuelle³ est $e_k = 0$. Alors, pour que l'expression (55) garde un sens, il faut que μ reste négatif ou nul :

$$\mu \leq 0 \tag{56}$$

Deux cas sont alors possibles, selon que le système de bosons est condensé ou non.

α. Bosons non condensés

Lorsque le paramètre μ prend une valeur suffisamment négative (très inférieure à l'opposé de l'énergie du premier niveau individuel excité e_1), la fonction dans la somme (55) reste suffisamment régulière pour que l'on puisse remplacer la somme discrète par une intégrale (à la limite des grands volumes). Le nombre moyen de particules s'écrit alors :

$$\langle \widehat{N} \rangle = N_{gp}^{BE}(\beta, \mu) \tag{57}$$

avec :

$$N_{gp}^{BE}(\beta, \mu) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{1}{e^{\beta(e_k - \mu)} - 1} \tag{58}$$

3. Si l'on choisissait d'autres conditions aux limites sur les parois de la boîte, l'énergie de l'état fondamental ne serait pas nulle en général ; on conviendrait alors de prendre cette valeur comme origine commune des énergies et du potentiel chimique, ce qui laisserait inchangés les calculs qui suivent.

Le même changement de variables que plus haut permet d'écrire cette expression sous la forme :

$$N_{gp}^{BE}(\beta, \mu) = \frac{\mathcal{V}}{(\lambda_T)^3} K_{3/2}(\beta\mu) \quad (59)$$

avec⁴ :

$$K_{3/2}(\beta\mu) = \pi^{-3/2} \int d^3\kappa \frac{1}{e^{\kappa^2 - \beta\mu} - 1} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{e^{x - \beta\mu} - 1} \quad (60)$$

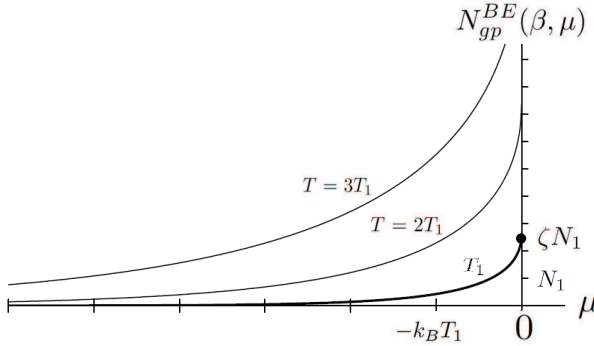


FIGURE 3 – Variations du nombre total de particules $N_{gp}^{BE}(\beta, \mu)$ d'un gaz parfait de bosons non condensé, en fonction de μ et à $\beta = 1/(k_B T)$ fixé. Le potentiel chimique doit rester négatif; la figure montre les courbes obtenues pour plusieurs températures $T = T_1$ (trait épais), $T = 2T_1$ et $T = 3T_1$. Les unités sur les axes sont les mêmes que celles de la figure 2 : l'énergie thermique $k_B T_1$ associée à la courbe $T = T_1$, ainsi que le nombre de particules $N_1 = \mathcal{V}/(\lambda_{T_1})^3$, où λ_{T_1} est la longueur d'onde thermique à cette même température T_1 . Lorsque le potentiel chimique tend vers zéro, les nombres de particules tendent vers une valeur finie. Pour $T = T_1$, cette valeur est ζN_1 , indiquée par un point sur l'axe des ordonnées, où ζ est donné en (61).

Cette figure a été aimablement fournie par Geneviève Tastevin.

Les variations de $N_{gp}^{BE}(\beta, \mu)$ en fonction de μ sont représentées sur la Figure 3. On y remarque que le nombre total de particules tend vers une limite $\zeta \times (\mathcal{V}/\lambda_T^3)$ lorsque μ tend vers zéro par valeurs négatives, où ζ est le nombre :

$$\zeta = K_{3/2}(0) = 2,612... \quad (61)$$

4. L'indice 3/2 se réfère à celui des fonctions $g_m(z)$, souvent appelées en physique fonctions de Bose (ou polylogarithmes). Elles sont définies par la série $g_m(z) = \sum_{l=1}^{\infty} z^l/l^m$. La valeur exacte du nombre ζ défini en (61) est celle de la somme $\sum_{l=1}^{\infty} l^{-3/2}$. Les Appendices B, D et E de l'ouvrage [3] donnent plus de détails sur les propriétés des fonction de Bose et de Fermi.

La fonction étant croissante avec μ , on a donc toujours :

$$N_{gp}^{BE}(\beta, \mu) \leq \zeta \frac{\mathcal{V}}{(\lambda_T)^3} \quad (62)$$

Il existe donc une limite supérieure infranchissable au nombre total de particules d'un gaz parfait de Bose non condensé.

β . *Bosons condensés*

Lorsque μ s'approche de zéro, la population du niveau fondamental est :

$$f_{\beta}^{BE}(e_0 - \mu) = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} \underset{\mu \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{\beta |\mu|} \quad (63)$$

Cette population diverge à la limite $\mu = 0$ et, si $|\mu|$ est suffisamment petit, rien ne l'empêche de devenir arbitrairement grande. Elle peut par exemple devenir proportionnelle au volume \mathcal{V} , auquel cas elle apporte une contribution lorsque $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ à la densité numérique de particules⁵ (nombre de particules par unité de volume).

Cette particularité est limitée à l'état fondamental, qui joue donc un rôle très différent des autres niveaux dans ce cas. Vérifions en effet que la population du premier niveau excité ne peut pas donner lieu à un effet similaire, en supposant le système contenu dans une boîte cubique⁶ de côté L . La population du premier niveau excité d'énergie $e_1 \sim \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$ s'écrit alors :

$$f_{\beta}^{BE}(e_1 - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(e_1 - \mu)} - 1} \underset{\mu \rightarrow 0}{\rightarrow} \frac{1}{\beta e_1} \sim \left(\frac{L}{\lambda_T} \right)^2 \quad (64)$$

(nous supposons la boîte suffisamment grande pour que $L \gg \lambda_T$, ce qui entraîne $\beta e_1 \ll 1$) ; elle ne peut donc être que proportionnelle au carré de L , donc au volume à la puissance 2/3 seulement. Ainsi, ce premier niveau excité ne peut pas apporter de contribution à la densité à la limite $L \rightarrow \infty$; il en est de même de tous les autres niveaux excités, dont les contributions sont encore plus faibles. Seule la contribution de l'état fondamental à la densité est donc arbitrairement grande.

Visiblement, cette valeur arbitrairement grande lorsque $\mu \rightarrow 0$ n'est pas prise en compte dans la relation (59), qui prévoit que la densité $N_{gp}^{BE}(\beta, \mu)/\mathcal{V}$ reste inférieure à une valeur finie comme l'indique (62). Ce n'est pas surprenant : du fait des variations extrêmement rapides de la population du premier niveau au suivant, il n'est plus possible de calculer le nombre moyen de particules en remplaçant dans (55) la somme discrète par une intégrale ; un calcul plus précis est nécessaire. On montre alors que seule la population de l'état fondamental doit être calculée séparément, mais que la somme des populations de tous les niveaux excités (dont aucun ne participe à la divergence de densité) peut encore être obtenue par une intégrale comme précédemment. La population totale du système physique est donc simplement la somme de l'intégrale du second membre de (57) et de la contribution N_0 du

5. La limite où $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ alors que la densité reste constante est souvent appelée "limite thermodynamique".

6. Comme plus haut, nous prenons des conditions aux limites périodiques sur les parois de la boîte. Si on imposait la nullité des fonctions d'ondes sur les parois, les coefficients numériques des énergies individuelles seraient modifiés, mais cela ne changerait rien au raisonnement.

niveau fondamental :

$$\langle \widehat{N} \rangle = N_{gp}^{BE}(\beta, 0) + N_0 \quad (65)$$

avec :

$$N_0 = \frac{1}{1 - e^{-\beta\mu}} \underset{\mu \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{\beta |\mu|} \quad (66)$$

Ainsi, lorsque $\mu \rightarrow 0$, la population totale de tous les niveaux excités (niveaux autres que le fondamental) reste pratiquement constante et égale à sa limite supérieure (62); seule celle N_0 du niveau fondamental augmente sans limite. La condition pour que N_0 devienne comparable à la population totale des niveaux excités est que le second membre de (66) soit du même ordre de grandeur que le second membre de (62), soit :

$$\mu \gtrsim -k_B T \frac{\lambda_T^3}{\mathcal{V}} \Rightarrow N_0 \gtrsim \frac{\mathcal{V}}{\lambda_T^3} \quad (67)$$

(μ restant bien sûr toujours négatif). Quand cette condition est satisfaite, une fraction significative des particules s'accumulent dans le niveau individuel fondamental, et on dit que ce niveau possède une "population macroscopique" (proportionnelle au volume); on peut même arriver à des situations où la majorité des particules occupent toutes le même état quantique. C'est le phénomène qui porte le nom de "condensation de Bose-Einstein" (il a été prévu par Einstein en 1935, à la suite des travaux de Bose sur les statistiques quantiques applicables aux photons). Il se produit lorsque la densité totale n_{tot} atteint le maximum prévu par la formule (62), soit :

$$n_{tot} = \frac{\zeta}{\lambda_T^3} \simeq \frac{2,612}{\lambda_T^3} \quad (68)$$

Cette condition indique que la distance moyenne entre particules est de l'ordre de la longueur d'onde thermique λ_T .

Initialement, la condensation de Bose-Einstein a été considérée plus comme une curiosité mathématique qu'un phénomène physique important. Plus tard, on a réalisé qu'elle joue un rôle important dans la superfluidité de l'Hélium 4 liquide, bien que ce soit un système où les particules interagissent constamment, donc très loin d'un gaz parfait. Dans les gaz dilués, la condensation de Bose-Einstein a été observée pour la première fois en 1995 et a donné lieu depuis à de très nombreuses expériences.

5. Equation d'état, pression

On appelle "équation d'état" d'un fluide à l'équilibre thermique la relation qui lie, pour un nombre de particules donné N , ses variables de pression P , de volume V , et de température $T = 1/k_B\beta$. Nous avons déjà étudié les variations du nombre total moyen de particules, il nous faut maintenant examiner celles de la pression d'un gaz parfait de fermions ou de bosons.

5-a. Fermions

Le grand potentiel d'un gaz parfait de fermions est donné par (9). L'équation (14) indique que ce grand potentiel est égal à l'opposé du produit du volume \mathcal{V} par la pression P du système à l'équilibre thermique. On a donc :

$$\begin{aligned} P\mathcal{V} &= k_B T \sum_k \text{Log} \left[1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \right] \\ &= \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} k_B T \int d^3k \text{Log} \left[1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \right] \end{aligned} \quad (69)$$

(où la seconde égalité est valable à la limite des grands volumes). En simplifiant par $\mathcal{V} = L^3$, on obtient la pression d'un système de fermions contenu dans une boîte de dimensions macroscopiques :

$$\begin{aligned} P &= (2\pi)^{-3} k_B T \int d^3k \text{Log} \left[1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \right] \\ &= \frac{1}{\beta \lambda_T^3} I_{5/2}(\beta\mu) \end{aligned} \quad (70)$$

avec :

$$\begin{aligned} I_{5/2}(\beta\mu) &= \pi^{-3/2} \int d^3\kappa \text{Log} \left[1 + e^{\beta\mu - \kappa^2} \right] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \text{Log} \left[1 + e^{\beta\mu - x} \right] \end{aligned} \quad (71)$$

où x a été défini en (53).

Pour obtenir l'équation d'état, nous devons relier la pression P , le volume \mathcal{V} , et la température T du système physique, en supposant le nombre de particules donné. Mais nous avons utilisé l'ensemble grand-canonique (cf. Appendice VI), où la température est directement déterminée par le choix du paramètre β , et où le volume est également fixé, mais où le nombre de particules ne l'est pas : sa valeur moyenne est fonction d'un paramètre, le potentiel chimique μ (lorsque β et \mathcal{V} sont donnés). Mathématiquement, la pression P apparaît alors comme une fonction de \mathcal{V} , T et μ et non pas comme une fonction de \mathcal{V} , T et du nombre de particules. Cependant, en faisant varier μ , on obtient les valeurs de la pression et du nombre de particules du système physique, ce qui permet de parcourir point par point l'équation d'état sous forme paramétrique. Si l'on voulait obtenir l'équation d'état sous forme explicite, il faudrait éliminer le potentiel chimique entre (47) et (70) ; comme ce n'est en général pas possible exactement sous une forme algébrique, on se contente généralement de l'équation d'état sous forme paramétrique, qui permet effectivement d'obtenir toutes les valeurs possibles des variables d'état. Il existe également un "développement du viriel" en puissances de la fugacité $e^{\beta\mu}$ qui permet d'effectuer explicitement l'élimination de μ à tous les ordres successifs ; son exposé dépasserait cependant le cadre de cet ouvrage.

5-b. Bosons

La pression d'un gaz parfait de bosons est donnée par la valeur du grand potentiel (12), compte tenu de la relation (14) qui le relie à la pression P et au

volume \mathcal{V} . On a donc :

$$\begin{aligned} P\mathcal{V} &= -k_B T \sum_k \text{Log} \left[1 - e^{-\beta(e_k - \mu)} \right] \\ &= -\frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} k_B T \int d^3k \text{Log} \left[1 - e^{-\beta(e_k - \mu)} \right] \end{aligned} \quad (72)$$

(la seconde relation étant valable à la limite des grands volumes). Nous avons donc :

$$\begin{aligned} P &= -\frac{k_B T}{(2\pi)^3} \int d^3k \text{Log} \left[1 - e^{-\beta(e_k - \mu)} \right] \\ &= \frac{1}{\beta \lambda_T^3} K_{5/2}(\beta\mu) \end{aligned} \quad (73)$$

avec :

$$\begin{aligned} &K_{5/2}(\beta\mu) \\ &= -\pi^{-3/2} \int d^3\kappa \text{Log} \left[1 - e^{\beta\mu - \kappa^2} \right] = \frac{-2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \text{Log} \left[1 - e^{\beta\mu - x} \right] \end{aligned} \quad (74)$$

D'autre part, lorsque $\mu \rightarrow 0$, la contribution P_0 du niveau fondamental à la pression écrite en (72) est :

$$P_0 = -\frac{k_B T}{\mathcal{V}} \text{Log} \left[1 - e^{\beta\mu} \right] \simeq -\frac{k_B T}{\mathcal{V}} \text{Log} \left[-\beta\mu \right] \quad (75)$$

soit, lorsque le potentiel chimique s'approche de zéro comme en (67) :

$$P_0 \simeq \frac{k_B T}{\mathcal{V}} \text{Log} \frac{\mathcal{V}}{\lambda_T^3} \quad (76)$$

qui tend vers zéro à la limite des grands volumes. Pour un grand système, la contribution à la pression du niveau fondamental reste donc négligeable devant celle de tous les autres niveaux d'énergie individuelle; la raison est que cette autre contribution fait intervenir un nombre de niveaux d'autant plus élevé que le système est grand. Ainsi, et contrairement à ce qui se produit pour le nombre moyen total de particules, la contribution des particules condensées à la pression s'annule à la limite des grands volumes.

Comme pour les fermions, l'équation d'état résulte alors de l'élimination du potentiel chimique μ entre l'équation (73) donnant la pression et (65) donnant le nombre total de particules. Contrairement à un gaz parfait de fermions, dont le nombre de particules et la pression croissent sans limites lorsque μ et la densité augmentent, pour un système de bosons la pression ne croît pas indéfiniment; à partir du moment où il est condensé, seul le nombre de particules dans l'état individuel fondamental continue à augmenter, pas la pression. En d'autres termes, on obtient un système physique de compressibilité infinie, donc en réalité un système physique marginalement pathologique (un système dont la pression diminue quand le volume décroît est instable). Cependant cette pathologie n'est qu'une conséquence du fait que nous avons totalement ignoré les interactions entre bosons; dès que l'on introduit des interactions répulsives, si faibles soient-elles, la compressibilité redevient finie et la pathologie disparaît.

En conclusion de ce complément, l'étude du gaz parfait fournit une belle illustration des simplifications que permet l'utilisation systématique des opérateurs de création et d'annihilation dans les calculs. Nous verrons dans les compléments suivants que ces simplifications continuent à se produire lorsqu'on tient compte des interactions, pourvu qu'on le fasse dans le cadre de l'approximation du champ moyen. Nous verrons même au Complément B_{XVI} que, pour un système en interactions, et sans faire une telle approximation, les fonctions de distribution d'un gaz parfait continuent à présenter une certaine utilité pour exprimer les valeurs moyennes de diverses grandeurs physiques.

Complément C_{XV}

Systèmes de bosons condensés, équation de Gross-Pitaevskii

1	Notations, ket variationnel	57
1-a	Hamiltonien	58
1-b	Choix du ket variationnel	58
2	Une première approche	59
2-a	Fonction d'onde d'essai pour des bosons sans spin, énergie moyenne	59
2-b	Optimisation variationnelle	60
3	Généralisation, calcul en notation de Dirac	62
3-a	Energie moyenne	62
3-b	Minimisation de l'énergie	63
3-c	Obtention de l'équation de Gross-Pitaevskii	64
4	Discussion physique	65
4-a	Energie et potentiel chimique	66
4-b	Longueur de relaxation	67
4-c	Autre ket d'essai : fragmentation du condensat	68

Le phénomène de condensation de Bose-Einstein d'un système physique de N bosons identiques a été introduit au § 4-b- β du Complément B_{XV} pour un gaz parfait (sans interactions). Dans ce complément, nous montrons comment on peut décrire ce phénomène lorsque les bosons interagissent ; nous allons utiliser une méthode d'approximation variationnelle (Complément E_{XI}) permettant de décrire l'état fondamental de ce système physique dans le cadre de l'approximation du champ moyen. Nous commençons au § 1 par introduire les notations et le ket variationnel. Puis, au § 2, nous étudions des bosons sans spin ; c'est un cas où le raisonnement direct en termes de fonctions d'onde est aisé, l'utilisation des opérateurs de création et d'annihilation n'apportant aucune simplification majeure aux calculs. Ceci nous conduira à une première version de l'équation de Gross-Pitaevskii. Nous reviendrons ensuite dans le § 3 aux notations de Dirac et aux opérateurs de création pour traiter le cas plus général, celui où les particules peuvent avoir un spin. Ceci nous permettra de définir l'opérateur potentiel de Gross-Pitaevskii et d'obtenir une version plus générale de l'équation. Enfin, au § 4, nous discuterons quelques propriétés de l'équation de Gross-Pitaevskii, le rôle du potentiel chimique, l'apparition d'une longueur de relaxation, et les effets énergétiques d'une "fragmentation d'un condensat" (ces mots seront définis au § 4-c).

1. Notations, ket variationnel

Commençons par préciser les notations, ainsi que la famille variationnelle de vecteurs d'états qui permet des calculs relativement simples pour un ensemble de bosons identiques en interaction.

1-a. Hamiltonien

L'opérateur hamiltonien \widehat{H} que nous considérons est la somme de l'opérateur d'énergie cinétique \widehat{H}_0 , de l'énergie potentielle à un corps \widehat{V}_{ext} , et de l'énergie d'interaction \widehat{W}_{int} :

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}_{\text{ext}} + \widehat{W}_{\text{int}} \quad (1)$$

Le premier terme \widehat{H}_0 est simplement la somme des opérateurs d'énergie cinétique individuelle $K_0(q)$ associés à chaque particule q :

$$\widehat{H}_0 = \sum_q K_0(q) \quad (2)$$

où :

$$K_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} \quad (3)$$

De même, \widehat{V}_{ext} est la somme des opérateurs potentiels extérieurs $V_1(\mathbf{R}_q)$, dépendant chacun de l'opérateur position \mathbf{R}_q de la particule q :

$$\widehat{V}_{\text{ext}} = \sum_{q=1}^N V_1(\mathbf{R}_q) \quad (4)$$

Enfin, \widehat{W}_{int} est la somme des énergies d'interaction associées à toutes les paires de particules :

$$\widehat{W}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{q \neq q'=1}^N W_2(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) \quad (5)$$

(cette somme peut également être écrite comme une somme sur $q < q'$, à condition de supprimer le facteur $1/2$ qui la précède).

1-b. Choix du ket variationnel

Nous choisissons en premier lieu un état quantique individuel arbitraire $|\theta\rangle$ que nous supposons normalisé :

$$\langle \theta | \theta \rangle = 1 \quad (6)$$

et notons a_θ^\dagger l'opérateur de création associé. Les kets variationnels à N particules que nous considérons sont définis par la famille de tous ceux qui peuvent s'écrire sous la forme :

$$|\widetilde{\Psi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left[a_\theta^\dagger \right]^N |0\rangle \quad (7)$$

où $|\theta\rangle$ varie avec la seule contrainte (6). Si l'on considère une base $\{|\theta_k\rangle\}$ de l'espace des états individuels dont le premier vecteur est $|\theta_1\rangle = |\theta\rangle$, la relation (A-17) du

Chapitre XV indique que ce ket est simplement un état de Fock dont le seul nombre d'occupation non nul est le premier :

$$|\widetilde{\Psi}\rangle = |n_1 = N, n_2 = 0, n_3 = 0, \dots\rangle \quad (8)$$

Un ensemble de bosons qui occupent tous le même état individuel est appelé un "condensat de Bose-Einstein".

La relation (8) montre que les kets $|\widetilde{\Psi}\rangle$ sont donc normalisés à 1. Nous allons faire varier $|\theta\rangle$, donc $|\widetilde{\Psi}\rangle$, et minimiser l'énergie moyenne :

$$\widetilde{E} = \langle \widetilde{\Psi} | \widehat{H} | \widetilde{\Psi} \rangle \quad (9)$$

2. Une première approche

Commençons par étudier un cas simple, celui où les bosons sont sans spin. Ceci nous permettra de raisonner en termes de fonction d'onde, dans un cas où c'est possible sans compliquer les calculs.

2-a. Fonction d'onde d'essai pour des bosons sans spin, énergie moyenne

Si nous supposons qu'un seul état individuel est peuplé, la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ est simplement le produit de N fonctions $\theta(\mathbf{r})$:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \theta(\mathbf{r}_1) \theta(\mathbf{r}_2) \dots \theta(\mathbf{r}_N) \quad (10)$$

avec :

$$\theta(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \theta \rangle \quad (11)$$

Cette fonction d'onde est évidemment symétrique par échange de toutes les particules, et convient donc pour un ensemble de bosons identiques.

En représentation positions, chaque opérateur $K_0(q)$ défini en (3) correspond à $(-\hbar^2/2m) \Delta_{\mathbf{r}_q}$, où $\Delta_{\mathbf{r}_q}$ est le laplacien par rapport à la position \mathbf{r}_q ; on a donc :

$$\begin{aligned} \langle \widehat{H}_0 \rangle &= \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_{q=1}^N \int d^3 r_1 \dots \int d^3 r_q \dots \int d^3 r_N \\ &\quad \times \theta^*(\mathbf{r}_1) \dots \theta^*(\mathbf{r}_q) \dots \theta^*(\mathbf{r}_N) \times \theta(\mathbf{r}_1) \dots \Delta \theta(\mathbf{r}_q) \dots \theta(\mathbf{r}_N) \end{aligned} \quad (12)$$

Dans cette expression, toutes les variables d'intégration autres que \mathbf{r}_q introduisent simplement le carré de la norme de la fonction $\theta(\mathbf{r})$, qui vaut 1 ; reste donc juste une intégrale sur \mathbf{r}_q , pour laquelle \mathbf{r}_q joue le rôle d'une variable muette, de sorte que sa valeur est indépendante de q . Ainsi toutes les valeurs de q donnent-elles la même contribution, de sorte que :

$$\langle \widehat{H}_0 \rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} N \int d^3 r \theta^*(\mathbf{r}) \Delta \theta(\mathbf{r}) \quad (13)$$

Pour l'énergie potentielle à un corps, le même calcul donne :

$$\langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle = N \int d^3 r \theta^*(\mathbf{r}) V_1(\mathbf{r}) \theta(\mathbf{r}) \quad (14)$$

Enfin, le calcul de l'énergie d'interaction est du même type, à ceci près qu'il faut maintenant garder deux variables d'intégration au lieu d'une seule; on obtient un résultat proportionnel au nombre $N(N-1)/2$ de paires de variables d'intégration :

$$\langle \widehat{W}_2 \rangle = \frac{N(N-1)}{2} \int d^3r \int d^3r' \theta^*(\mathbf{r})\theta^*(\mathbf{r}') W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \theta(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}') \quad (15)$$

L'énergie moyenne variationnelle \widetilde{E} est donnée par la somme de ces trois termes :

$$\widetilde{E} = \langle \widehat{H}_0 \rangle + \langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle + \langle \widehat{W}_2 \rangle \quad (16)$$

2-b. Optimisation variationnelle

Nous procédons maintenant à l'optimisation de l'énergie ainsi calculée, afin de déterminer les fonctions d'onde $\theta(\mathbf{r})$ qui lui donnent une valeur minimale.

$\alpha.$ Variation de la fonction d'onde

Attribuons maintenant à la fonction $\theta(\mathbf{r})$ une variation :

$$\theta(\mathbf{r}) \Rightarrow \theta(\mathbf{r}) + e^{i\chi} df(\mathbf{r}) \quad (17)$$

où $df(\mathbf{r})$ est une fonction infinitésimale et χ un nombre réel arbitraire. A priori, $df(\mathbf{r})$ doit être choisie de façon à tenir compte de la contrainte de normalisation (6), qui impose ici que l'intégrale du carré du module de $\theta(\mathbf{r})$ reste constante. Nous pouvons cependant en tenir compte par la méthode des multiplicateurs de Lagrange (Appendice V). Ceci nous conduit ici à introduire un multiplicateur μ (nous verrons au § 4-a que ce multiplicateur s'interprète comme le potentiel chimique) et à minimiser la fonction :

$$\widetilde{F} = \widetilde{E} - \mu \int d^3r \theta^*(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}) \quad (18)$$

Nous considérons maintenant la variation infinitésimale $df(\mathbf{r})$ comme libre de toute contrainte. La variation $d\widetilde{F}$ de la fonction \widetilde{F} est alors la somme de 4 variations, celles des trois termes de (16) et celle de l'intégrale dans (18). Par exemple celle de $\langle \widehat{H}_0 \rangle$ s'écrit :

$$d\langle \widehat{H}_0 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} N \int d^3r [e^{-i\chi} df^*(\mathbf{r})\Delta\theta(\mathbf{r}) + e^{i\chi} \theta^*(\mathbf{r})\Delta df(\mathbf{r})] \quad (19)$$

qui est la somme d'un terme en $e^{-i\chi}$ et d'un autre en $e^{i\chi}$. De façon générale, la variation $d\widetilde{F}$ s'exprime comme une somme de deux termes :

$$d\widetilde{F} = dc_1 e^{-i\chi} + dc_2 e^{i\chi} \quad (20)$$

dont le premier donne la contribution de $df^*(\mathbf{r})$ et le second celle de $df(\mathbf{r})$. Mais, si \widetilde{F} est stationnaire, $d\widetilde{F}$ doit s'annuler quel que soit le choix arbitraire de χ réel. Le choix $\chi = 0$ impose $dc_1 + dc_2 = 0$, alors que le choix $\chi = \pi/2$ conduit (en multipliant par i) à $dc_1 - dc_2 = 0$. Par somme et différence, on voit que les deux coefficients dc_1 et dc_2 sont nécessairement nuls. En d'autres termes, nous pouvons écrire la nullité de $d\widetilde{F}$ lorsque $\theta^*(\mathbf{r})$ varie mais pas $\theta(\mathbf{r})$ – ou inversement¹.

1. En d'autres termes, les parties réelle et imaginaire de $\theta(\mathbf{r})$ peuvent être variées indépendamment pour trouver la condition de stationnarité.

β. Condition de stationnarité : équation de Gross-Pitaevskii

Ecrivons donc la nullité de $d\tilde{F}$ lorsque seul $\theta^*(\mathbf{r})$ varie et que $\chi = 0$. Nous devons ajouter les termes provenant de (13) et (14), puis de (15) pour lequel il faut faire la somme de la variation provenant de celle de $\theta^*(\mathbf{r})$ avec celle provenant de variations de $\theta^*(\mathbf{r}')$ – ces deux variations ne différant que par la notation de variables d'intégration, elles sont égales et se doublent. Si enfin nous ajoutons la variation de l'intégrale de (18), nous obtenons :

$$d\tilde{F} = N \int d^3r \, df^*(\mathbf{r}) \times \left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}) - \mu \right] + (N-1) \int d^3r' \, W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \, \theta^*(\mathbf{r}') \theta(\mathbf{r}') \right\} \theta(\mathbf{r}) \quad (21)$$

Or cette variation doit s'annuler, quel que soit $df^*(\mathbf{r})$; il faut donc que la fonction qui multiplie $df^*(\mathbf{r})$ dans l'intégrale soit nulle, et en conséquence que $\theta(\mathbf{r})$ soit solution de l'équation en $\varphi(\mathbf{r})$:

$$\left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}) \right] + (N-1) \int d^3r' \, W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \, |\varphi(\mathbf{r}')|^2 \right\} \varphi(\mathbf{r}) = \mu \varphi(\mathbf{r}) \quad (22)$$

Cette équation est l'équation de Gross-Pitaevskii indépendante du temps. Elle ressemble à une équation de Schrödinger aux valeurs propres, mais avec un terme potentiel :

$$V_1(\mathbf{r}) + (N-1) \int d^3r' \, W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \, |\varphi(\mathbf{r}')|^2 \quad (23)$$

qui contient la fonction d'onde φ elle-même dans l'intégrale sur d^3r' ; c'est donc une équation non linéaire. Physiquement, le terme potentiel en W_2 exprime le fait que, dans le cadre de l'approximation du champ moyen, chaque particule se déplace dans le potentiel moyen créé par toutes les autres, toutes décrites par la même fonction d'onde $\varphi(\mathbf{r}')$; le facteur $(N-1)$ correspond au fait que chaque particule interagit avec $(N-1)$ autres particules. L'équation de Gross-Pitaevskii est souvent utilisée pour décrire les propriétés d'un ensemble de bosons dans l'état fondamental (condensat de Bose-Einstein).

γ. Potentiel de portée nulle

On écrit souvent l'équation de Gross-Pitaevskii dans le cadre de l'approximation où la portée du potentiel d'interaction entre particules, microscopique, est très petite par rapport aux distances sur lesquelles varie la fonction d'onde $\varphi(\mathbf{r})$. On peut alors effectuer la substitution :

$$W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \implies g \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (24)$$

où la constante g porte le nom de "constante de couplage" ; on appelle parfois un tel potentiel "potentiel de contact" ou, dans d'autres contextes, "pseudo-potentiel de Fermi". On obtient alors :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}) + (N-1) g |\varphi(\mathbf{r})|^2 \right] \varphi(\mathbf{r}) = \mu \varphi(\mathbf{r}) \quad (25)$$

Que ce soit sous cette forme² ou la forme plus générale (22), l'équation comprend un terme cubique en $\varphi(\mathbf{r})$. Il peut compliquer la recherche de la solution mathématique, mais il est aussi la source de nombreux effets physiques intéressants. Cette équation permet par exemple de comprendre l'existence de vortex quantifiés dans l'hélium liquide superfluide.

δ. Autre normalisation

Plutôt que de normaliser la fonction d'onde $\varphi(\mathbf{r})$ à 1 dans tout l'espace, on préfère parfois une normalisation qui tienne compte du nombre de particules, en posant :

$$\int d^3r |\varphi(\mathbf{r})|^2 = N \quad (26)$$

ce qui revient simplement à multiplier par \sqrt{N} la fonction d'onde que nous avons utilisée jusqu'à maintenant. En chaque point \mathbf{r} de l'espace, la densité (numérique) de particules $n(\mathbf{r})$ est alors donnée par :

$$n(\mathbf{r}) = |\varphi(\mathbf{r})|^2 \quad (27)$$

Avec cette normalisation, le facteur $(N-1)$ de (25) est remplacé par $(N-1)/N$, qu'on approxime généralement par 1 lorsque N est grand. L'équation de Gross-Pitaevskii devient alors :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}) + g |\varphi(\mathbf{r})|^2 \right] \varphi(\mathbf{r}) = \mu \varphi(\mathbf{r}) \quad (28)$$

Comme déjà mentionné, nous verrons au § 4-a que μ n'est autre que le potentiel chimique.

3. Généralisation, calcul en notation de Dirac

Nous reprenons maintenant le raisonnement précédent dans un cas plus général, sans supposer que les bosons ont nécessairement un spin nul. La famille variationnelle est constituée par l'ensemble des vecteurs d'état à N particules écrits en (7). Le potentiel à un corps peut, à la fois, dépendre de la position \mathbf{r} et agir sur le spin (particules dans un gradient de champ magnétique par exemple).

3-a. Énergie moyenne

Pour effectuer le calcul de la valeur moyenne $\langle \widetilde{\Psi} | \widehat{H} | \widetilde{\Psi} \rangle$ de l'énergie, nous utilisons une base $\{|\theta_k\rangle\}$ de l'espace des états individuels dont le premier vecteur est $|\theta_1\rangle = |\theta\rangle$.

2. Stricto sensu, ce que l'on appelle généralement équation de Gross-Pitaevskii est souvent la forme obtenue lorsque la constante de couplage g est remplacée par $4\pi\hbar^2 a_0/m$, où a_0 est la "longueur de diffusion" ; cette dernière est définie à partir du déphasage de collision $\delta_l(k)$ (Chapitre VIII, § C) par la limite $\delta_0(k) \sim -ka_0$ lorsque $k \rightarrow 0$. La longueur de diffusion est une fonction du potentiel d'interaction $W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, mais ne lui est en général pas simplement proportionnelle, contrairement aux éléments de matrice de $W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Une démonstration spécifique de cette forme de l'équation de Gross-Pitaevskii devient alors nécessaire, par exemple à partir de la méthode du "pseudo-potentiel".

La relation (B-12) du Chapitre XV permet d'écrire la valeur moyenne $\langle \widehat{H}_0 \rangle$ sous la forme :

$$\langle \widehat{H}_0 \rangle = \sum_{k,l} \langle \theta_k | K_0 | \theta_l \rangle \langle \widetilde{\Psi} | a_k^\dagger a_l | \widetilde{\Psi} \rangle \quad (29)$$

Comme $|\widetilde{\Psi}\rangle$ est un état de Fock dont toutes les populations sont nulles sauf celle de l'état $|\theta_1\rangle$, le ket $a_k^\dagger a_l |\widetilde{\Psi}\rangle$ n'est non nul que si $l = 1$; il est alors orthogonal à $|\widetilde{\Psi}\rangle$ si $k \neq 1$. Seul subsiste donc dans la somme le terme $k = l = 1$; l'opérateur $a_1^\dagger a_1$ multiplie alors le ket par sa population N . Donc :

$$\langle \widehat{H}_0 \rangle = N \langle \theta_1 | K_0 | \theta_1 \rangle \quad (30)$$

Le même raisonnement permet d'écrire :

$$\langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle = N \langle \theta_1 | V_1 | \theta_1 \rangle \quad (31)$$

La relation (C-16) du Chapitre XV indique que la valeur moyenne de l'énergie d'interaction est égale à³ :

$$\langle \widehat{W}_2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n} \langle 1 : \theta_k ; 2 : \theta_l | W_2(1,2) | 1 : \theta_m ; 2 : \theta_n \rangle \langle \widetilde{\Psi} | a_k^\dagger a_l^\dagger a_n a_m | \widetilde{\Psi} \rangle \quad (32)$$

Ici, pour que le second élément de matrice ne soit pas nul, il faut que les 2 indices m et n valent 1, ainsi que les deux indices k et l (sinon l'opérateur aboutit à un autre état de Fock orthogonal à $|\widetilde{\Psi}\rangle$). Quand tous les indices valent 1, l'opérateur multiplie le ket $|\widetilde{\Psi}\rangle$ par $N(N-1)$. Donc :

$$\langle \widehat{W}_2 \rangle = \frac{N(N-1)}{2} \langle 1 : \theta_1 ; 2 : \theta_1 | W_2(1,2) | 1 : \theta_1 ; 2 : \theta_1 \rangle \quad (33)$$

L'énergie moyenne d'interaction est donc simplement égale au produit du nombre $N(N-1)/2$ de paires qu'on peut former à partir de N particules par l'énergie d'interaction moyenne pour une paire donnée.

Nous pouvons remplacer $|\theta_1\rangle$ par $|\theta\rangle$ puisqu'ils sont égaux. L'énergie variationnelle, obtenue par somme de (30), (31) et (33), s'écrit alors :

$$\widetilde{E} = N \langle \theta | [K_0 + V_1] | \theta \rangle + \frac{N(N-1)}{2} \langle 1 : \theta ; 2 : \theta | W_2(1,2) | 1 : \theta ; 2 : \theta \rangle \quad (34)$$

3-b. Minimisation de l'énergie

Considérons maintenant une variation de $|\theta\rangle$:

$$|\theta\rangle \Rightarrow |\theta\rangle + e^{i\chi} |\delta\alpha\rangle \quad (35)$$

où $|\delta\alpha\rangle$ est un ket infinitésimal quelconque de l'espace des états individuels et χ un nombre réel arbitraire. Pour assurer que la condition de normalisation (6) reste satisfaite, nous imposons cependant à $|\delta\alpha\rangle$ de rester orthogonal à $|\theta\rangle$:

$$\langle \delta\alpha | \theta \rangle = 0 \quad (36)$$

3. Nous simplifions la notation $W_2(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$ en $W_2(1,2)$.

de sorte que $\langle \theta | \theta \rangle$ reste bien égal à 1 (au premier ordre en $|\delta\alpha\rangle$). Lorsqu'on reporte (35) dans (34) pour obtenir la variation $d\tilde{E}$ de l'énergie variationnelle, on obtient une somme de deux termes : un premier provenant de la variation du ket $|\theta\rangle$, proportionnelle à $e^{i\chi}$; un second provenant de la variation du bra $\langle \theta|$, proportionnelle à $e^{-i\chi}$. Le résultat est donc de la forme :

$$d\tilde{E} = dc_1 e^{i\chi} + dc_2 e^{-i\chi} \quad (37)$$

Mais la condition de stationnarité de \tilde{E} s'applique quelle que soit la valeur arbitraire réelle de χ . Comme plus haut (§ 2-b- α), il s'ensuit que dc_1 et dc_2 sont tous deux nuls, de sorte que nous pouvons imposer la nullité de la variation \tilde{E} obtenue en faisant varier, soit le bra $\langle \theta|$ mais pas le ket $|\theta\rangle$, soit le contraire.

La variation du bra seul nous conduit alors à la condition :

$$0 = N \langle \delta\alpha | [K_0 + V_1 - \mu] | \theta \rangle + \frac{N(N-1)}{2} [\langle 1 : \delta\alpha ; 2 : \theta | W_2(1,2) | 1 : \theta ; 2 : \theta \rangle + \langle 1 : \theta ; 2 : \delta\alpha | W_2(1,2) | 1 : \theta ; 2 : \theta \rangle] \quad (38)$$

Mais, puisque l'opérateur d'interaction $W_2(1,2)$ est symétrique, les deux derniers termes entre crochets de cette équation sont égaux. Il vient donc (en divisant par N) :

$$0 = \langle \delta\alpha | [K_0 + V_1 - \mu] | \theta \rangle + (N-1) \langle 1 : \delta\alpha ; 2 : \theta | W_2(1,2) | 1 : \theta ; 2 : \theta \rangle \quad (39)$$

3-c. Obtention de l'équation de Gross-Pitaevskii

Transformons l'équation (39) en introduisant l'opérateur de Gross-Pitaevskii V_{GP}^θ , défini comme l'opérateur à une particule dont les éléments de matrice dans une base $\{|u_i\rangle\}$ quelconque sont :

$$\langle u_i | V_{GP}^\theta | u_j \rangle = (N-1) \langle 1 : u_i ; 2 : \theta | W_2(1,2) | 1 : u_j ; 2 : \theta \rangle \quad (40)$$

qui entraîne immédiatement que :

$$\langle \chi | V_{GP}^\theta | \chi' \rangle = (N-1) \langle 1 : \chi ; 2 : \theta | W_2(1,2) | 1 : \chi' ; 2 : \theta \rangle \quad (41)$$

où $|\chi\rangle$ et $|\chi'\rangle$ sont deux kets quelconques à une particule – il suffit pour démontrer cette relation de les développer sur la base $\{|u_i\rangle\}$ et d'appliquer la relation (40). On remarque l'absence de terme d'échange dans cet opérateur potentiel ; ce terme n'existe pas lorsque les deux particules qui interagissent occupent le même état quantique individuel. L'équation (39) devient alors :

$$0 = \langle \delta\alpha | [K_0 + V_1 + V_{GP}^\theta] | \theta \rangle \quad (42)$$

Cette condition de stationnarité doit être vérifiée quel que soit le bra $\langle \delta\alpha |$ orthogonal à $|\theta\rangle$, selon la contrainte (36). Elle exprime que le ket obtenu en faisant agir l'opérateur $[K_0 + V_1 + V_{GP}^\theta]$ sur $|\theta\rangle$ a des composantes nulles sur tous les vecteurs orthogonaux à $|\theta\rangle$; sa seule composante non nulle est sur $|\theta\rangle$ lui-même, ce qui signifie que ce ket est nécessairement colinéaire à $|\theta\rangle$. En d'autres termes, $|\theta\rangle$ est

vecteur propre de l'opérateur avec la valeur propre μ (réelle puisque l'opérateur est hermitique) :

$$[K_0 + V_1 + V_{GP}^\theta] |\theta\rangle = \mu |\theta\rangle \quad (43)$$

Pour finir, la valeur optimale $|\varphi\rangle$ de $|\theta\rangle$ est solution de l'équation de Gross-Pitaevskii :

$$[K_0 + V_1 + V_{GP}^\varphi] |\varphi\rangle = \mu |\varphi\rangle \quad (44)$$

qui généralise (28) à des particules à spin, et pour des potentiels à un et deux corps arbitraires. Pour chaque particule, l'opérateur V_{GP}^φ représente le champ moyen exercé par toutes les autres dans le même état $|\varphi\rangle$.

Remarque :

L'opérateur de Gross-Pitaevskii V_{GP}^θ n'est autre qu'une trace partielle sur la seconde particule :

$$V_{GP}^\theta(1) = (N - 1) \text{Tr}_2 \left\{ P^\theta(2) W_2(1, 2) \right\} \quad (45)$$

où $P^\theta(2)$ est l'opérateur de projection $P^\theta(2)$ de l'état de la particule 2 sur $|\theta\rangle$:

$$P^\theta(2) = \sum_k |1 : u_k\rangle \langle 1 : u_k| \otimes |2 : \theta\rangle \langle 2 : \theta| = \sum_k |1 : u_k; 2 : \theta\rangle \langle 1 : u_k; 2 : \theta| \quad (46)$$

Calculons en effet la trace partielle du second membre de (45). Si, pour effectuer la trace (Complément EIII, § 5.b), nous choisissons pour la particule 2 une base des états $\{|\theta_n\rangle\}$ dont le premier vecteur $|\theta_1\rangle$ coïncide avec $|\theta\rangle$, il vient :

$$\langle u_i | \text{Tr}_2 \left\{ P^\theta(2) W_2(1, 2) \right\} | u_j \rangle = \sum_n \langle 1 : u_i; 2 : \theta_n | P^\theta(2) W_2(1, 2) | 1 : u_j; 2 : \theta_n \rangle \quad (47)$$

Le remplacement de $P^\theta(2)$ par sa valeur (46) fait alors apparaître le produit de δ_{ik} (pour le produit scalaire associé à la particule 1) par δ_{n1} (pour celui associé à la particule 2). Le résultat est donc :

$$\langle u_i | \text{Tr}_2 \left\{ P^\theta(2) W_2(1, 2) \right\} | u_j \rangle = \langle 1 : u_i; 2 : \theta | W_2(1, 2) | 1 : u_j; 2 : \theta \rangle \quad (48)$$

qui redonne effectivement la définition initiale (40) de V_{GP}^θ . Ceci démontre que (45) est une autre définition possible du potentiel de Gross-Pitaevskii.

4. Discussion physique

Nous avons étudié les conditions que doit satisfaire la fonction d'onde variationnelle pour rendre l'énergie stationnaire, mais pas la valeur de l'énergie ainsi obtenue ; nous le faisons maintenant, ce qui nous permettra de montrer que le paramètre μ n'est autre que le potentiel chimique associé au système physique des bosons en interaction. Puis nous introduirons la notion de longueur de relaxation, et discuterons les effets sur l'énergie finale provenant de la fragmentation d'un condensat unique en plusieurs condensats associés à des états quantiques individuels distincts.

4-a. Énergie et potentiel chimique

Le ket $|\varphi\rangle$ étant normé, en multipliant (44) par le bra $\langle\varphi|$ et par N , nous obtenons :

$$N \langle\varphi| [K_0 + V_1 + V_{GP}^\varphi] |\varphi\rangle = N\mu \quad (49)$$

On reconnaît alors immédiatement dans le membre de gauche les valeurs moyennes de l'énergie cinétique et du potentiel extérieur; d'autre part, compte tenu de la définition (41) de V_{GP}^φ , on a :

$$N \langle\varphi| V_{GP}^\varphi |\varphi\rangle = N(N-1) \langle 1 : \varphi; 2 : \varphi | W_2(1, 2) | 1 : \varphi; 2 : \varphi \rangle \quad (50)$$

qui n'est autre que le double de l'énergie potentielle d'interaction écrite en (33) lorsque $|\theta_1\rangle = |\varphi\rangle$. Donc :

$$N\mu = \langle H_0 \rangle + \langle V_1 \rangle + 2 \langle \widehat{W}_2 \rangle = \widetilde{E} + \langle \widehat{W}_2 \rangle \quad (51)$$

Pour obtenir l'énergie \widetilde{E} , on peut remarquer que $N\mu/2$ donne la somme de $\langle \widehat{W}_2 \rangle$ et de la moitié des énergies cinétiques et potentielle extérieure; on peut donc obtenir \widetilde{E} en ajoutant les deux moitiés manquantes :

$$\widetilde{E} = \frac{N}{2} [\mu + \langle\varphi| [K_0 + V_1] |\varphi\rangle] \quad (52)$$

L'avantage de cette formule est qu'elle ne fait intervenir que des opérateurs à une particule, et non à deux, ce qui simplifie les calculs; l'énergie d'interaction est contenue implicitement dans μ .

La quantité μ ne donne donc pas directement l'énergie moyenne. Cependant, si l'on dérive par rapport à N l'équation (34) écrite pour $|\theta\rangle = |\varphi\rangle$, on obtient :

$$\frac{d\widetilde{E}}{dN} = \langle\varphi| [K_0 + V_1] |\varphi\rangle + \left(N - \frac{1}{2}\right) \langle\varphi, \varphi| W_2(1, 2) |\varphi, \varphi\rangle \quad (53)$$

Si N est grand, on peut sans introduire d'erreur notable remplacer dans cette expression $(N - 1/2)$ par $(N - 1)$; multipliant par N , on voit alors apparaître une somme d'énergies moyennes :

$$N \frac{d\widetilde{E}}{dN} = \langle H_0 \rangle + \langle V_1 \rangle + 2 \langle \widehat{W}_2 \rangle \quad (54)$$

soit, compte tenu de la relation (51) :

$$\frac{d\widetilde{E}}{dN} = \mu \quad (55)$$

Or, dans l'ensemble grand-canonique à température nulle, la dérivée de l'énergie par rapport au nombre de particules (à volume constant) est égale au potentiel chimique (Appendice VI, § 2-b); la quantité μ que nous avons introduite mathématiquement comme un multiplicateur de Lagrange s'interprète donc simplement comme ce potentiel chimique.

4-b. Longueur de relaxation

Une notion importante est celle de “longueur de relaxation” (appelée “*healing length*” en anglais). Elle caractérise la façon dont une solution de l’équation de Gross-Pitaevskii indépendante du temps réagit à une contrainte spatiale, comme de s’annuler sur une paroi ou sur la ligne d’un cœur de vortex. Nous allons en donner un ordre de grandeur en nous limitant à un calcul approximatif.

Supposons que le potentiel $V_1(\mathbf{r})$ soit nul dans la région considérée, et divisons l’équation (28) par $\varphi(\mathbf{r})$; nous obtenons alors :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\varphi(\mathbf{r})}{\varphi(\mathbf{r})} + g|\varphi(\mathbf{r})|^2 = \mu \quad (56)$$

qui montre que le membre de gauche de cette équation est indépendant de \mathbf{r} . Supposons alors que $\varphi(\mathbf{r})$ soit constant dans toute une région de l’espace, où la densité est n_0 , indépendante de \mathbf{r} :

$$n_0 = |\varphi(\mathbf{r})|^2 \quad (57)$$

mais doit s’annuler à la frontière de cette région. Pour simplifier, nous supposons que le problème se ramène à une dimension, et que $\varphi(\mathbf{r})$ ne dépend que de la première coordonnée x de \mathbf{r} ; l’annulation de la fonction d’onde se fait alors sur un plan, que l’on peut supposer être le plan $x = 0$. Nous cherchons à évaluer un ordre de grandeur de la distance ξ sur laquelle la fonction d’onde passe d’une valeur pratiquement constante à zéro, en d’autres termes de la portée du régime transitoire en x où la fonction d’onde change de régime. Dans la région où $\varphi(\mathbf{r})$ est constante, la relation (56) donne :

$$\mu = gn_0 \quad (58)$$

En revanche, dans toute la région où $\varphi(\mathbf{r})$ a nettement déca, et en particulier tout près de l’origine, on a :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\varphi(\mathbf{r})}{\varphi(\mathbf{r})} \sim \mu = gn_0 \quad (59)$$

En une dimension⁴, on obtient ainsi l’équation différentielle :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) \sim gn_0\varphi(x) \quad (60)$$

dont les solutions sont des superpositions d’exponentielles $e^{\pm ix/\xi}$, avec :

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mgn_0}} \quad (61)$$

La solution qui s’annule en $x = 0$ est obtenue par différence de ces deux exponentielles; elle est proportionnelle à $\sin(x/\xi)$, fonction qui croît à partir de zéro sur une longueur caractéristique ξ . La variation de la fonction d’onde au voisinage de la paroi où elle doit s’annuler est représentée sur la Figure 1.

4. Il est en fait possible de faire un raisonnement plus précis en vérifiant que la solution $\varphi(x) = \sqrt{n_0} \operatorname{th} x/\xi\sqrt{2}$ satisfait l’équation (56) à une dimension.

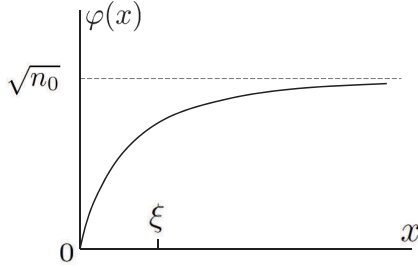


FIGURE 1 – Variations en fonction de la position x de la fonction d’onde $\varphi(x)$ au voisinage d’une paroi en $x = 0$ où elle doit s’annuler. Cette variation s’effectue sur une distance de l’ordre de la longueur de relaxation ξ définie en (61), d’autant plus courte que les interactions entre particules sont plus fortes. Puis, lorsque x croît, la fonction d’onde tend vers une asymptote constante d’ordonnée $\sqrt{n_0}$, représentée en tiretés.

Cette “longueur de relaxation” ξ est d’autant plus courte que les interactions sont plus fortes ; elle varie comme l’inverse de la racine carrée du produit de la constante de couplage g par la densité n_0 . Physiquement, la longueur de relaxation résulte d’un compromis entre les forces d’interaction répulsives, qui tendent à rendre la fonction d’onde la plus constante possible dans l’espace, et l’énergie cinétique, qui tend à minimiser sa dérivée spatiale (alors que la fonction d’onde doit s’annuler en $x = 0$) ; ξ est (à un coefficient 2π près) la longueur d’onde de de Broglie d’une particule libre dont l’énergie cinétique serait comparable à l’énergie de répulsion gn_0 dans le système de bosons.

4-c. Autre ket d’essai : fragmentation du condensat

Nous montrons maintenant que des interactions répulsives stabilisent un “condensat” de bosons, c’est-à-dire un état où toutes les particules occupent le même état individuel, et non pas un état “fragmenté” où certaines d’entre elles occupent un état quantique différent (même très proche en énergie). Au lieu d’un ket d’essai (7), où toutes les particules forment un condensat de Bose-Einstein parfait dans un seul état quantique $|\theta\rangle$, nous pouvons “fragmenter” ce condensat en répartissant les N particules entre deux états individuels distincts. Nous prenons donc un ket d’essai où N_a particules sont dans l’état $|\theta_a\rangle$ et $N_b = N - N_a$ dans l’état orthogonal $|\theta_b\rangle$:

$$|\widetilde{\Psi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_a!N_b!}} [a_{\theta_a}^\dagger]^{N_a} [a_{\theta_b}^\dagger]^{N_b} |0\rangle \quad (62)$$

Calculons ce qu’il advient alors de l’énergie moyenne variationnelle. Dans la formule (29) qui donne la valeur moyenne de l’énergie cinétique, pour que l’effet de l’opérateur $a_k^\dagger a_l$ conduise à un état de Fock qui coïncide avec $|\widetilde{\Psi}\rangle$ il faut, soit que

$k = l = a$, soit que $k = l = b$. Il vient donc :

$$\langle \widehat{H}_0 \rangle = N_a \langle \theta_a | K_0 | \theta_a \rangle + N_b \langle \theta_b | K_0 | \theta_b \rangle \quad (63)$$

Le calcul de l'énergie potentielle à un corps se fait de même, et conduit à :

$$\langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle = N_a \langle \theta_a | V_1 | \theta_a \rangle + N_b \langle \theta_b | V_1 | \theta_b \rangle \quad (64)$$

Dans les deux cas, on trouve que les deux états peuplés contribuent proportionnellement à leurs populations respectives, ce qui est naturel pour des énergies ne mettant en jeu qu'une seule particule.

Pour l'énergie d'interaction à deux corps, nous utilisons à nouveau la relation (32). L'opérateur $a_k^\dagger a_l^\dagger a_n a_m$ qui y figure reconstruit l'état de Fock $|\widetilde{\Psi}\rangle$ dans les cas suivants :

- soit $k = l = m = n = a$ ou b , ce qui donne la contribution :

$$\begin{aligned} & \frac{N_a(N_a - 1)}{2} \langle 1 : \theta_a ; 2 : \theta_a | W_2(1, 2) | 1 : \theta_a ; 2 : \theta_a \rangle \\ & + \frac{N_b(N_b - 1)}{2} \langle 1 : \theta_b ; 2 : \theta_b | W_2(1, 2) | 1 : \theta_b ; 2 : \theta_b \rangle \end{aligned} \quad (65)$$

- soit $k = m = a$ et $l = n = b$, ou $k = m = b$ et $l = n = a$; ces deux possibilités introduisent la même contribution (car l'opérateur W_2 est symétrique), ce qui fait disparaître le facteur 1/2 et conduit au terme direct :

$$N_a N_b \langle 1 : \theta_a ; 2 : \theta_b | W_2(1, 2) | 1 : \theta_a ; 2 : \theta_b \rangle \quad (66)$$

- enfin, soit $k = n = a$ et $l = m = b$, ou $k = n = b$ et $l = m = a$, dont la somme introduit le terme d'échange (lui aussi sans facteur 1/2) :

$$N_a N_b \langle 1 : \theta_a ; 2 : \theta_b | W_2(1, 2) | 1 : \theta_b ; 2 : \theta_a \rangle \quad (67)$$

Les termes direct et d'échange sont ceux schématisés sur la Figure 3 du Chapitre XV (avec le remplacement de $|u_i\rangle$ par $|\theta_a\rangle$ et de $|u_j\rangle$ par $|\theta_b\rangle$), le terme direct à gauche, le terme d'échange à droite.

Au total, l'énergie variationnelle est donnée par :

$$\begin{aligned} \widetilde{E} &= N_a [\langle \theta_a | [K_0 + V_1] | \theta_a \rangle] + N_b [\langle \theta_b | [K_0 + V_1] | \theta_b \rangle] \\ &+ \frac{N_a(N_a - 1)}{2} \langle 1 : \theta_a ; 2 : \theta_a | W_2(1, 2) | 1 : \theta_a ; 2 : \theta_a \rangle \\ &+ \frac{N_b(N_b - 1)}{2} \langle 1 : \theta_b ; 2 : \theta_b | W_2(1, 2) | 1 : \theta_b ; 2 : \theta_b \rangle \\ &+ N_a N_b \langle 1 : \theta_a ; 2 : \theta_b | W_2(1, 2) | 1 : \theta_a ; 2 : \theta_b \rangle \\ &+ N_a N_b \langle 1 : \theta_a ; 2 : \theta_b | W_2(1, 2) | 1 : \theta_b ; 2 : \theta_a \rangle \end{aligned} \quad (68)$$

Comme plus haut, le terme correspondant à l'interaction entre particules dans le même état $|\theta_a\rangle$ est proportionnel au nombre $N_a(N_a - 1)/2$ de paires de particules dans cet état ; il en est de même pour le terme d'interaction correspondant à l'interaction entre particules dans le même état $|\theta_b\rangle$. Le terme direct associé à l'interaction

entre deux particules dans un état différent a pour coefficient $N_a N_b$, donc le nombre de paires. Mais au terme direct s'ajoute un terme d'échange, lui aussi proportionnel à $N_a N_b$, qui montre l'existence d'une interaction supplémentaire. L'origine physique de cette augmentation d'interaction est l'effet de groupement de deux bosons dans des états quantiques différents, que nous discuterons plus en détail au § 3-b du Complément A_{XVI} : sous l'effet de leur indiscernabilité, deux bosons occupant des états individuels orthogonaux présentent des corrélations entre leurs positions, dont le résultat est d'augmenter la probabilité de les trouver au même point de l'espace. En revanche, cette augmentation ne se produit pas si les deux bosons occupent le même état quantique individuel.

Supposons maintenant que les éléments de matrice diagonaux de $[K_0 + V_1]$ entre les états $|\theta_a\rangle$ et $|\theta_b\rangle$ soient pratiquement égaux ; par exemple, si ces deux états sont, pour des particules sans spin, les deux états d'énergies les plus basses dans une boîte cubique de côté L , la différence d'énergie correspondante est proportionnelle à $1/L^2$ – donc extrêmement faible à la limite des grands L . De même, nous allons supposer que les éléments de matrice de $W_2(1, 2)$ sont tous égaux, comme c'est le cas si la portée (microscopique) du potentiel d'interaction entre particules est très petite devant les distances sur lesquelles varient les fonction d'onde des deux états. Nous pouvons alors remplacer dans tous les éléments de matrice les $|\theta_a\rangle$ et les $|\theta_b\rangle$ par un même ket $|\theta\rangle$. Comme $N_a + N_b = N$, nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= N \langle \theta | [K_0 + V_1] | \theta \rangle \\ &+ \frac{1}{2} [N_a(N_a - 1) + N_b(N_b - 1) + 2N_a N_b] \langle 1 : \theta; 2 : \theta | W_2(1, 2) | 1 : \theta; 2 : \theta \rangle \\ &+ N_a N_b \langle 1 : \theta; 2 : \theta | W_2(1, 2) | 1 : \theta; 2 : \theta \rangle \end{aligned} \quad (69)$$

Mais :

$$N(N - 1) = (N_a + N_b)(N_a + N_b - 1) = N_a(N_a - 1) + N_b(N_b - 1) + 2N_a N_b \quad (70)$$

de sorte que :

$$\tilde{E} = N \langle \theta | [K_0 + V_1] | \theta \rangle + \frac{N(N - 1)}{2} \langle 1 : \theta; 2 : \theta | W_2(1, 2) | 1 : \theta; 2 : \theta \rangle + \Delta \tilde{E} \quad (71)$$

avec :

$$\Delta \tilde{E} = N_a N_b \langle 1 : \theta; 2 : \theta | W_2(1, 2) | 1 : \theta; 2 : \theta \rangle \quad (72)$$

Nous retrouvons ainsi le résultat (34) augmenté d'un terme supplémentaire $\Delta \tilde{E}$, qui est un terme d'échange. Deux cas sont alors possibles, selon que les interactions entre particules sont attractives ou répulsives. Dans le premier cas, la fragmentation du condensat diminue l'énergie, et conduit donc à un état plus stable. Nous voyons ainsi qu'un condensat où un seul état individuel est peuplé tend, dès que les interactions sont attractives, à se décomposer en deux condensats, qui chacun peuvent à leur tour se décomposer, etc. ce qui indique que le condensat unique initial est instable (nous retrouverons et discuterons cette instabilité dans le cas plus général de l'équilibre thermique à température non nulle, au § 2-b du Complément F_{XV}). Lorsque les interactions sont répulsives, nous constatons au contraire que l'énergie

augmente, de sorte que la fragmentation conduit à un état moins stable ; des interactions répulsives tendent donc à stabiliser un condensat dans un seul état quantique individuel⁵. Nous interpréterons ce résultat au § 3-b du Complément A_{XVI} en termes de changement de la fonction de corrélation de la position des particules (effet de groupement des bosons). Quant au gaz parfait, intermédiaire entre les deux précédents, c'est un cas limite marginal : l'ajout d'interactions attractives infinitésimales, si petites soient-elles, déstabilise tout condensat.

5. Nous n'avons discuté dans ce complément que le cas simple de bosons sans spin contenus dans une boîte. Lorsque les bosons ont accès à plusieurs états quantiques internes, et dans d'autres géométries, il peut se produire des situations plus compliquées où l'état fondamental est fragmenté [4].

Complément D_{XV}

Équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps

1	Evolution temporelle	73
	1-a Fonctionnelle variationnelle	74
	1-b Calcul variationnel : équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps	75
	1-c Phonons et spectre de Bogolubov	76
2	Analogie hydrodynamique	80
	2-a Courant de probabilité	81
	2-b Evolution de la vitesse	82
3	Écoulements métastables, superfluidité	83
	3-a Géométrie torique, quantification de la circulation, vortex	83
	3-b Barrière de potentiel répulsive	85
	3-c Vitesse critique, métastabilité de l'écoulement	88
	3-d Généralisation ; aspect topologique	92

Ce complément reprend les calculs du Complément C_{XV} concernant l'étude d'un ensemble de bosons se trouvant tous dans le même état individuel, afin de les généraliser au cas où cet état dépend du temps. Nous étudierons les variations temporelles du vecteur d'état à N particules par une méthode variationnelle du même type que celle du Complément C_{XV}. Nous obtiendrons ainsi une approximation de champ moyen dépendant du temps. Ceci nous conduira au § 1 à obtenir une version dépendante du temps de l'équation de Gross-Pitaevskii, dont nous étudierons un certain nombre de propriétés, comme les petites oscillations qui mettent en évidence les phonons de Bogolubov. Au § 2, nous étudierons les lois de conservation locales qui découlent de cette équation, et qui se prêtent à une analogie hydrodynamique ; nous discuterons l'apparition d'une longueur de relaxation caractéristique. Enfin, au § 3, nous montrerons comment l'équation de Gross-Pitaevskii prédit l'existence d'écoulements métastables et de la superfluidité.

1. Evolution temporelle

Nous supposons que le ket décrivant le système physique des N bosons peut s'écrire comme dans la relation (7) du Complément C_{XV} :

$$|\widetilde{\Psi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left[a_{\theta}^{\dagger}(t) \right]^N |0\rangle \tag{1}$$

mais en considérant que le ket individuel $|\theta\rangle$ est maintenant une fonction du temps $|\theta(t)\rangle$; l'opérateur de création dans l'état individuel correspondant est alors un opérateur $a_{\theta}^{\dagger}(t)$ dépendant du temps :

$$a_{\theta}^{\dagger}(t) |0\rangle = |\theta(t)\rangle \tag{2}$$

Nous supposons que les variations de $|\theta(t)\rangle$ sont quelconques, mais que le ket reste normé à tout instant :

$$\langle\theta(t)|\theta(t)\rangle = 1 \quad (3)$$

Notre but est de trouver les variations temporelles de $|\theta(t)\rangle$ qui induisent pour $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle$ des variations les plus proches possibles de celles données par l'équation de Schrödinger exacte à N particules. Le potentiel à une particule V_1 peut maintenant lui aussi dépendre du temps, et nous l'écrirons $V_1(t)$.

1-a. Fonctionnelle variationnelle

Introduisons la fonctionnelle de $|\Psi(t)\rangle$:

$$S[|\Psi(t)\rangle] = \left\{ \int_{t_0}^{t_1} dt \langle\Psi(t)| \left[i\hbar \frac{d}{dt} - H(t) \right] |\Psi(t)\rangle \right\} + \frac{i\hbar}{2} \left[\langle\Psi(t_0)|\Psi(t_0)\rangle - \langle\Psi(t_1)|\Psi(t_1)\rangle \right] \quad (4)$$

On peut montrer que cette fonctionnelle est stationnaire lorsque $|\Psi(t)\rangle$ est solution de l'équation de Schrödinger exacte (la démonstration de cette propriété est explicitée au § 2 du Complément F_{XV}). Lorsque $|\Psi(t)\rangle$ appartient à une famille variationnelle, rendre la fonctionnelle stationnaire permet donc d'identifier, parmi tous les kets de la famille, celui qui s'approche le plus de la solution exacte de l'équation de Schrödinger. Nous allons donc chercher à rendre stationnaire cette fonctionnelle en prenant pour famille variationnelle l'ensemble des kets $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle$ de la forme (1) lorsque le ket individuel $|\theta(t)\rangle$ dépend du temps.

Dans cette expression, la condition (3) entraîne que la norme de $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle$ reste constante, de sorte que le second crochet qui suit l'intégrale dans le second membre de (4) est nul. Il nous faut ensuite évaluer la valeur moyenne de l'hamiltonien $H(t)$, que de fait nous avons déjà calculée en (34) au Complément C_{XV} :

$$\begin{aligned} \langle\widetilde{\Psi}(t)| [H(t)] |\widetilde{\Psi}(t)\rangle = \\ N \langle\theta(t)| [K_0 + V_1(t)] |\theta(t)\rangle + \frac{N(N-1)}{2} \langle\theta(t), \theta(t)| W_2(1, 2) |\theta(t), \theta(t)\rangle \end{aligned} \quad (5)$$

Il ne nous reste plus à calculer que le terme de (4) contenant la dérivée temporelle.

Ce terme contient l'élément de matrice diagonal :

$$\langle\widetilde{\Psi}(t)| \left[i\hbar \frac{d}{dt} \right] |\widetilde{\Psi}(t)\rangle = \frac{i\hbar}{N!} \langle 0 | [a_\theta(t)]^N \sum_{k=0}^{N-1} [a_\theta^\dagger(t)]^k \frac{da_\theta^\dagger}{dt} [a_\theta^\dagger(t)]^{N-k-1} | 0 \rangle \quad (6)$$

Lorsque dt est infinitésimal, l'opérateur da_θ^\dagger/dt est proportionnel à la différence $a_\theta^\dagger(t+dt) - a_\theta^\dagger(t)$, donc à la différence entre deux opérateurs de création relatifs à deux bases orthonormées légèrement différentes ; mais, pour des bosons, tous les opérateurs de création commutent entre eux, quelle que soit la base. Donc, dans chacun des termes de la somme sur k , on peut ramener l'opérateur dérivé en dernière position, obtenant

à chaque fois le même résultat quel que soit k ; ainsi, la somme est égale à N fois l'expression :

$$\frac{1}{N!} \langle 0 | \left[a_\theta(t) \right]^N \left[a_\theta^\dagger(t) \right]^{N-1} \frac{da_\theta^\dagger}{dt} | 0 \rangle \quad (7)$$

Mais :

$$\left[a_\theta(t) \right]^{N-1} \left[a_\theta^\dagger(t) \right]^N | 0 \rangle = N! | 1 : \theta(t) \rangle = N! \left[a_\theta^\dagger(t) \right] | 0 \rangle \quad (8)$$

Reportant le bra associé à cette expression dans (6) multiplié par N , nous obtenons :

$$\widetilde{\langle \Psi(t) |} \left[i\hbar \frac{d}{dt} \right] \widetilde{|\Psi(t)\rangle} = i\hbar N \langle 0 | a_\theta(t) \frac{da_\theta^\dagger}{dt} | 0 \rangle = N \langle \theta(t) | \left[i\hbar \frac{d}{dt} \right] | \theta(t) \rangle \quad (9)$$

Regroupant ces résultats, nous obtenons donc :

$$S \left[\widetilde{\langle \Psi(t) |} \right] = - \int_{t_0}^{t_1} dt \left\{ N \langle \theta(t) | \left[[K_0 + V_1(t)] - i\hbar \frac{d}{dt} \right] | \theta(t) \rangle + \frac{N(N-1)}{2} \langle 1 : \theta(t); 2 : \theta(t) | W_2(1, 2) | 1 : \theta(t); 2 : \theta(t) \rangle \right\} \quad (10)$$

1-b. Calcul variationnel : équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps

Effectuons maintenant une variation infinitésimale de $|\theta(t)\rangle$:

$$|\theta(t)\rangle \Rightarrow |\theta(t)\rangle + e^{i\chi} |\delta\theta(t)\rangle \quad (11)$$

afin de trouver les kets $|\theta(t)\rangle$ qui rendent l'expression précédente stationnaire. Comme pour la recherche d'un état stationnaire au Complément C_{XV}, nous obtenons des variations provenant du ket infinitésimal $e^{i\chi} |\delta\theta(t)\rangle$ et d'autres provenant du bra infinitésimal $e^{-i\chi} \langle \delta\theta(t) |$; mais χ est arbitraire, et le même raisonnement nous permet de conclure que chacune de ces deux variations doit être nulle. Si nous écrivons donc seulement celle associée à la variation du bra, nous constatons que la condition de stationnarité demande que $|\theta(t)\rangle$ soit égal à une solution de l'équation en $|\varphi(t)\rangle$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi(t)\rangle = [K_0 + V_1(t) + V_{GP}^\varphi(t)] |\varphi(t)\rangle \quad (12)$$

L'opérateur de champ moyen $V_{GP}^\varphi(t)$ est défini comme dans les relations (45) et (46) du Complément C_{XV} par une trace partielle :

$$V_{GP}^\varphi(1, t) = (N-1) \text{Tr}_2 \left\{ P^{\varphi(t)}(2) W_2(1, 2) \right\} \quad (13)$$

où $P^{\varphi(t)}$ est le projecteur sur le ket $|\varphi(t)\rangle$:

$$P^{\varphi(t)} = |\varphi(t)\rangle \langle \varphi(t) | \quad (14)$$

Ici l'état de la particule 2 sur laquelle on prend la trace dépend du temps, ce qui explique la dépendance en temps que nous avons ajoutée dans le champ moyen.

L'équation (12) constitue la forme générale de l'équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps.

Revenons maintenant, comme au § 2 du Complément C_{XV}, au cas simple où les bosons sont sans spin et interagissent par le potentiel de contact :

$$W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (15)$$

La définition (13) du potentiel de Gross-Pitaevskii permet de calculer son effet en représentation position, comme au Complément C_{XV}. Les mêmes calculs que ceux des §§ 2-b-β et 2-b-γ de ce complément permettent de montrer que la relation (12) devient l'équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps (nous supposons que N est suffisamment grand pour qu'on puisse remplacer $N - 1$ par N) :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}, t) + Ng |\varphi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \varphi(\mathbf{r}, t) \quad (16)$$

Si l'on norme la fonction d'onde $\varphi(\mathbf{r}, t)$ à N :

$$\int d^3r |\varphi(\mathbf{r}, t)|^2 = N \quad (17)$$

l'équation (16) se simplifie en :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}, t) + g |\varphi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \varphi(\mathbf{r}, t) \quad (18)$$

Remarque :

On peut vérifier que cette évolution conserve bien la norme de $|\varphi(t)\rangle$, comme le demande (3). Sans le terme non linéaire de (16), ce serait évident, puisqu'on sait que la norme est conservée par l'équation de Schrödinger habituelle. Avec le terme non linéaire, on pourrait reprendre la démonstration, mais nous verrons au § 2-a que c'est toujours le cas.

1-c. Phonons et spectre de Bogolubov

Toujours pour des bosons sans spin, nous considérons maintenant un système uniforme et au repos de particules contenues dans une boîte cubique de côté L ; le potentiel extérieur $V_1(\mathbf{r})$ est donc nul dans cette boîte, infini à l'extérieur. Une première façon de tenir compte de l'effet de ce potentiel est d'imposer des conditions aux limites de nullité de la fonction d'onde sur les parois. Dans beaucoup de problèmes, il est cependant plus commode de prendre des conditions aux limites périodiques (Complément C_{XIV}, § 1-c), avec lesquelles la fonction d'onde de l'état individuel d'énergie la plus basse est simplement une constante dans la boîte. Nous allons donc considérer un système dans son état fondamental dont la fonction d'onde de Gross-Pitaevskii est indépendante de \mathbf{r} :

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi_0(t) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{-i\mu t/\hbar} \quad (19)$$

avec la valeur de μ qui permet de satisfaire l'équation (16) :

$$\mu = \frac{Ng}{L^3} = gn_0 \quad (20)$$

où $n_0 = N/L^3$ est la densité du système. La comparaison avec la relation (58) du Complément C_{XV} permet de vérifier que μ est le potentiel chimique dans le fondamental. Nous supposons dans cette partie que les interactions sont répulsives (voir Remarque à la page 80) :

$$g \geq 0 \tag{21}$$

α. Propagation des excitations

Nous allons maintenant étudier quelles excitations peuvent se propager dans ce système physique. Sa fonction d'onde n'est alors plus la fonction d'onde uniforme dans l'espace (19), et nous allons supposer que :

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi_0(\mathbf{r}, t) + \delta\varphi(\mathbf{r}, t) \tag{22}$$

où $\delta\varphi(\mathbf{r}, t)$ est suffisamment petit pour être traité au premier ordre. Si nous reportons à cet ordre cette expression dans le second membre de (16), il apparaît dans le terme d'interaction la quantité du premier ordre :

$$\begin{aligned} \delta [Ng \varphi^2(\mathbf{r}, t)\varphi^*(\mathbf{r}, t)] &= Ng [(2\varphi_0\delta\varphi)\varphi_0^* + \varphi_0^2\delta\varphi^*] \\ &= gn_0 [2\delta\varphi + e^{-2i\mu t/\hbar}\delta\varphi^*] \end{aligned} \tag{23}$$

Nous obtenons donc à cet ordre :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta\varphi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + 2gn_0 \right] \delta\varphi(\mathbf{r}, t) + gn_0 e^{-2i\mu t/\hbar} \delta\varphi^*(\mathbf{r}, t) \tag{24}$$

qui montre que l'évolution de $\delta\varphi(\mathbf{r}, t)$ est couplée à celle de $\delta\varphi^*(\mathbf{r}, t)$. L'équation complexe conjuguée s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta\varphi^*(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - 2gn_0 \right] \delta\varphi^*(\mathbf{r}, t) - gn_0 e^{2i\mu t/\hbar} \delta\varphi(\mathbf{r}, t) \tag{25}$$

Nous pouvons faire disparaître les exponentielles dépendant du temps au second membre de ces équations en posant :

$$\begin{aligned} \delta\varphi(\mathbf{r}, t) &= \overline{\delta\varphi}(\mathbf{r}, t) e^{-i\mu t/\hbar} \\ \delta\varphi^*(\mathbf{r}, t) &= \overline{\delta\varphi}^*(\mathbf{r}, t) e^{i\mu t/\hbar} \end{aligned} \tag{26}$$

ce qui nous conduit à une équation différentielle à coefficients constants, qu'il est commode d'écrire sous forme matricielle :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \overline{\delta\varphi}(\mathbf{r}, t) \\ \overline{\delta\varphi}^*(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + gn_0 \right] & gn_0 \\ -gn_0 & \left[\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - gn_0 \right] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{\delta\varphi}(\mathbf{r}, t) \\ \overline{\delta\varphi}^*(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \tag{27}$$

où nous avons utilisé la définition (20) de μ pour remplacer $2gn_0 - \mu$ par gn_0 . Si maintenant nous recherchons les solutions dont la dépendance spatiale est une onde plane :

$$\begin{aligned} \overline{\delta\varphi}(\mathbf{r}, t) &= \widetilde{\delta\varphi}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ \overline{\delta\varphi}^*(\mathbf{r}, t) &= \widetilde{\delta\varphi}^*(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \tag{28}$$

l'équation différentielle devient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \widetilde{\delta\varphi}(\mathbf{k}, t) \\ \widetilde{\delta\varphi}^*(\mathbf{k}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + gn_0 \right] & gn_0 \\ -gn_0 & \left[-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - gn_0 \right] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widetilde{\delta\varphi}(\mathbf{k}, t) \\ \widetilde{\delta\varphi}^*(\mathbf{k}, t) \end{pmatrix} \quad (29)$$

dont l'équation aux valeurs propres $\hbar\omega(\mathbf{k})$ de la matrice s'écrit :

$$\left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + gn_0 - \hbar\omega(\mathbf{k}) \right] \left[-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - gn_0 - \hbar\omega(\mathbf{k}) \right] + (gn_0)^2 = 0 \quad (30)$$

soit :

$$[\hbar\omega(\mathbf{k})]^2 - \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + gn_0 \right]^2 + (gn_0)^2 = 0 \quad (31)$$

La solution de cette équation est :

$$\hbar\omega(\mathbf{k}) = \sqrt{\left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + gn_0 \right]^2 - (gn_0)^2} = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2gn_0 \right]} \quad (32)$$

(il existe également une solution de valeur opposée, ce qui est naturel puisque nous calculons en une fois l'évolution de $\widetilde{\delta\varphi}(t)$ et de son complexe conjugué ; pour notre discussion, nous nous contenterons de prendre en compte les valeurs positives). Si nous posons :

$$k_0 = \frac{2}{\hbar} \sqrt{gn_0 m} \quad (33)$$

la relation (32) s'écrit :

$$\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2m} \sqrt{k^2 (k^2 + k_0^2)} \quad (34)$$

Le spectre donné par (32) est représenté sur la Figure 1, où l'on voit le raccord entre la région linéaire en k aux basses énergies et la région quadratique à plus haute énergie ; il est appelé "spectre de Bogolubov" du système de bosons.

β. Discussion

Calculons l'évolution spatiale et temporelle de la densité de particules $n(\mathbf{r}, \mathbf{t})$ lorsque $\widetilde{\delta\varphi}(\mathbf{r}, t)$ est donné par la relation (28). La relation (27) du Complément C_{XV} indique que la densité de particules en chaque point \mathbf{r} de l'espace est donnée par le module au carré de la fonction d'onde $\varphi(\mathbf{r}, t)$. Au premier ordre en $\delta\varphi(\mathbf{r}, t)$, nous obtenons donc :

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \left[\varphi_0(t) e^{-i\mu t/\hbar} \right]^* [\delta\varphi(\mathbf{r}, t)] + \text{c.c.} \quad (35)$$

(où c.c. signifie "complexe conjugué") soit, si nous utilisons (26) et (28) :

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, \mathbf{t}) &= \left[\varphi_0^*(t) e^{i\mu t/\hbar} \right] \left[e^{-i\mu t/\hbar} \widetilde{\delta\varphi}(\mathbf{k}, 0) e^{i[\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})\mathbf{t}]} \right] + \text{c.c.} \\ &= \frac{1}{L^{3/2}} \left[\widetilde{\delta\varphi}(\mathbf{k}, 0) e^{i[\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})\mathbf{t}]} + \text{c.c.} \right] \end{aligned} \quad (36)$$

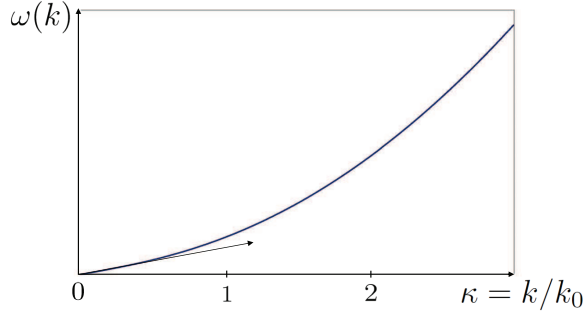


FIGURE 1 – Spectre de Bogolubov : variations de la fonction $\omega(\mathbf{k})$ de l'équation (32) en fonction de la variable sans dimension $\kappa = k/k_0$. Lorsque $\kappa \ll 1$, le spectre est linéaire, avec une pente qui donne la vitesse du son c ; lorsque $\kappa \gg 1$, le spectre est quadratique, comme pour une particule libre.

Le spectre des excitations que nous avons calculées correspond donc à des ondes de densité qui se propagent dans le milieu avec une vitesse de phase $\omega(\mathbf{k})/k$.

En l'absence d'interaction ($g = k_0 = 0$), ce spectre est simplement :

$$\hbar\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (37)$$

qui redonne la relation quadratique habituelle pour une particule libre. Physiquement, cela signifie qu'on peut exciter le système de bosons en transférant une particule de l'état individuel fondamental, de fonction d'onde $\varphi_0(\mathbf{r})$ et d'énergie cinétique nulle, vers n'importe quel état $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ d'énergie $\hbar^2 k^2/2m$.

En présence d'interactions, il n'est plus possible de limiter l'excitation à une seule particule, qui la transmet immédiatement aux autres; les excitations du système sont ce que l'on appelle des "excitations élémentaires", mettant en jeu un mouvement collectif de toutes les particules et des oscillations de la densité du système de bosons. Ici, nous constatons sur (34) que, si $k \ll k_0$:

$$\omega(\mathbf{k}) \sim kc \quad (38)$$

où c est défini par :

$$c = \frac{\hbar}{2m} k_0 = \sqrt{\frac{gn_0}{m}} \quad (39)$$

Ainsi, pour les petites valeurs de k , l'effet des interactions est de remplacer le spectre quadratique (37) par un spectre linéaire. La vitesse de phase de toutes les excitations dans ce domaine de valeurs de k est une constante c . On appelle cette constante "vitesse du son" dans le système de bosons en interaction, par analogie avec un fluide classique où la relation de dispersion des ondes sonores est linéaire, comme le prévoit l'équation de Helmholtz; nous verrons au § 3 que cette quantité c joue

un rôle important dans les calculs concernant la superfluidité, en particulier ceux de vitesses critiques. Si, au contraire, $k \gg k_0$, le spectre devient :

$$\hbar\omega(\mathbf{k}) \sim \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + gn_0 + .. \quad (40)$$

(les corrections suivantes étant en k_0^2/k^2 , k_0^4/k^4 , etc.). On retrouve donc à nouveau, avec une petite correction, le spectre d'une particule libre : si l'on injecte suffisamment d'énergie dans l'excitation du système, on arrive à exciter les particules individuelles presque comme si elles étaient indépendantes. La Figure 1 représente la variation complète du spectre (32), avec le raccord entre la région linéaire aux basses énergies et la région quadratique aux grandes énergies.

Remarque :

Comme nous avons supposé en (21) les interactions répulsives, les racines carrées dans (32) et (39) sont bien définies. Si la constante de couplage g devenait négative, la vitesse du son c deviendrait imaginaire, et l'on voit sur (32) qu'il en serait de même des fréquences $\omega(k)$ (au moins aux petites valeurs de k). Dans l'équation d'évolution (29), cela correspondrait à la présence de solutions en exponentielles réelles croissantes ou décroissantes en fonction du temps, au lieu d'exponentielles oscillantes. Une exponentielle croissante correspond à une instabilité du système : nous retrouvons ainsi, comme au § 4-c du Complément C_{XV}, qu'un système de bosons est rendu instable par toute interaction attractive, si faible soit-elle. Au § 4-b du Complément H_{XV}, nous verrons que cette instabilité subsiste lorsque la température n'est pas nulle. De façon générale, un condensat attractif occupant une grande région de l'espace tend à s'effondrer sur lui-même en se concentrant dans une région de plus en plus petite. Cependant, quand il est confiné dans une région finie (comme cela se produit dans certaines expériences où des atomes froids sont placés dans un piège magnéto-optique), toute déformation de la fonction d'onde qui permet d'approcher l'instabilité augmente également l'énergie du gaz ; il apparaît ainsi une barrière énergétique, de sorte que le système de bosons attractifs condensé peut rester métastable.

2. Analogie hydrodynamique

Nous reprenons maintenant l'étude de l'évolution temporelle de la fonction d'onde de Gross-Pitaevskii et des variations de la densité $n(\mathbf{r}, t)$, sans supposer comme au § 1-c que le système de bosons reste très proche de l'équilibre uniforme. Nous allons voir que l'équation de Gross-Pitaevskii peut être mise sous une forme semblable à l'équation hydrodynamique décrivant l'évolution d'un fluide. Pour cette discussion, il sera commode d'adopter la convention (17) où la fonction d'onde de Gross-Pitaevskii est normalisée au nombre de particules. L'équation (16) devient alors :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}, t) + gn(\mathbf{r}, t) \right] \varphi(\mathbf{r}, t) \quad (41)$$

où la densité locale de particules $n(\mathbf{r})$ est donnée par :

$$n(\mathbf{r}, t) = |\varphi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (42)$$

2-a. Courant de probabilité

Comme :

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{r}, t) = \varphi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{r}, t) + \varphi(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \varphi^*(\mathbf{r}, t) \quad (43)$$

on peut obtenir la variation temporelle de la densité en multipliant (41) par $\varphi^*(\mathbf{r}, t)$, puis sa complexe conjuguée par $\varphi(\mathbf{r}, t)$, et en additionnant les résultats obtenus ; les termes potentiels en $V_1(\mathbf{r}, t)$ et $gn(\mathbf{r}, t)$ disparaissent alors, et il vient :

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar}{2mi} [\varphi^*(\mathbf{r}, t) \Delta \varphi(\mathbf{r}, t) - \varphi(\mathbf{r}, t) \Delta \varphi^*(\mathbf{r}, t)] \quad (44)$$

Nous pouvons alors introduire un vecteur $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ par :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\varphi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \varphi(\mathbf{r}, t) - \varphi(\mathbf{r}, t) \nabla \varphi^*(\mathbf{r}, t)] \quad (45)$$

Lorsqu'on calcule la divergence de ce vecteur, les termes en $\nabla \varphi^* \cdot \nabla \varphi$ disparaissent, et ceux qui restent reproduisent le second membre de (44), avec le signe opposé. On obtient alors l'équation de conservation :

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (46)$$

Ainsi $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ est le courant de probabilité associé au système de bosons considéré. Par intégration dans tout l'espace, en utilisant le théorème de la divergence et en supposant que $\varphi(\mathbf{r}, t)$ (donc le courant) s'annule à l'infini, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3r n(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \int d^3r |\varphi(\mathbf{r}, t)|^2 = 0 \quad (47)$$

qui montre, comme annoncé plus haut, que l'équation de Gross-Pitaevskii conserve la norme de la fonction d'onde décrivant l'ensemble des particules.

Posons maintenant :

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \quad (48)$$

Le gradient de cette fonction s'écrit :

$$\nabla \varphi(\mathbf{r}, t) = e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \left[\nabla \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} + i \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} \nabla \alpha(\mathbf{r}, t) \right] \quad (49)$$

Il vient alors, par substitution dans (45) :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} n(\mathbf{r}, t) \nabla \alpha(\mathbf{r}, t) \quad (50)$$

ou, si l'on définit la vitesse locale des particules $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ comme le rapport entre le courant et la densité :

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)}{n(\mathbf{r}, t)} = \frac{\hbar}{m} \nabla \alpha(\mathbf{r}, t) \quad (51)$$

On peut ainsi définir un champ de vitesses, similaire au champ de vitesses d'un fluide en mouvement dans une certaine région de l'espace ; le rotationnel de ce champ de vitesses est nul en tout point.

2-b. Evolution de la vitesse

Calculons maintenant la dérivée temporelle de cette vitesse. Si nous dérivons (48), nous obtenons :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{r}, t) = e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} - \hbar \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \frac{\partial}{\partial t} \alpha(\mathbf{r}, t) \quad (52)$$

de sorte que nous pouvons isoler la variation temporelle de $\alpha(\mathbf{r}, t)$ en prenant la combinaison :

$$i\hbar \left[\varphi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{r}, t) - \varphi(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \varphi^*(\mathbf{r}, t) \right] = -2\hbar n(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \alpha(\mathbf{r}, t) \quad (53)$$

Calculons le membre de gauche de cette relation à partir de l'équation de Gross-Pitaevskii (18) et de sa complexe conjuguée. La divergence du gradient (49) permet d'obtenir le laplacien :

$$\begin{aligned} \Delta \varphi(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot \nabla \varphi(\mathbf{r}, t) = e^{i\alpha(\mathbf{r}, t)} \left[\Delta \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} + 2i \left(\nabla \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} \right) \cdot \nabla \alpha(\mathbf{r}, t) \right. \\ \left. + i \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} \Delta \alpha(\mathbf{r}, t) - \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} (\nabla \alpha(\mathbf{r}, t))^2 \right] \end{aligned} \quad (54)$$

Si nous reportons l'expression de la dérivée temporelle de $\varphi(\mathbf{r}, t)$ donnée par l'équation de Gross-Pitaevskii dans le membre de gauche de (53), nous obtenons alors pour ce membre de gauche :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} [\varphi^*(\mathbf{r}, t) \Delta \varphi(\mathbf{r}, t) + \varphi(\mathbf{r}, t) \Delta \varphi^*(\mathbf{r}, t)] + 2 [V_1(\mathbf{r}, t) + g n(\mathbf{r}, t)] |\varphi(\mathbf{r}, t)|^2 \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[2\sqrt{n(\mathbf{r}, t)} \Delta \left(\sqrt{n(\mathbf{r}, t)} \right) - 2n(\mathbf{r}, t) (\nabla \alpha(\mathbf{r}, t))^2 \right] \\ + 2 [V_1(\mathbf{r}, t) + g n(\mathbf{r}, t)] n(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (55)$$

Nous égalons alors ce résultat au membre de droite de (53), et nous obtenons après division des deux membres par $-2n(\mathbf{r}, t)$:

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\sqrt{n(\mathbf{r}, t)}} \Delta \left(\sqrt{n(\mathbf{r}, t)} \right) - (\nabla \alpha(\mathbf{r}, t))^2 \right] - [V_1(\mathbf{r}, t) + g n(\mathbf{r}, t)] \quad (56)$$

Compte tenu de (51), on arrive ainsi finalement à l'équation d'évolution de la vitesse $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$:

$$m \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \left[V_1(\mathbf{r}, t) + g n(\mathbf{r}, t) + \frac{m\mathbf{v}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{n(\mathbf{r}, t)}} \Delta \left(\sqrt{n(\mathbf{r}, t)} \right) \right] \quad (57)$$

Cette équation ressemble à l'équation classique de Newton ; en effet, son second membre contient la somme de la force correspondant au potentiel extérieur $V_1(\mathbf{r}, t)$, auquel s'ajoute le potentiel d'interaction moyenne avec les autres particules $gn(\mathbf{r})$;

le troisième terme dans le gradient est le terme classique de gradient de l'énergie cinétique¹ (comme dans l'équation de Bernoulli en hydrodynamique classique); seul le dernier terme est de nature purement quantique, comme l'atteste sa dépendance explicite en \hbar^2 . Ce terme quantique fait intervenir des dérivées spatiales de $n(\mathbf{r}, t)$, et n'est donc important que si les variations relatives $\delta n/n$ de la densité se font sur des distances suffisamment petites (ce terme est par exemple nul si la densité est uniforme); on l'appelle parfois "potentiel quantique", ou encore "terme de pression quantique" ou, dans d'autres contextes, "potentiel de Bohm". Une approximation couramment utilisée est de supposer que les variations spatiales de $n(\mathbf{r}, t)$ sont lentes, ce qui conduit à ignorer le terme de potentiel quantique; on aboutit alors à une approximation dite de Thomas-Fermi.

Nous retrouvons ainsi pour un système de N particules toute une série de propriétés de la fonction d'onde d'une particule unique, en particulier une vitesse locale directement proportionnelle au gradient de sa phase². Pour finir, la seule différence est que le potentiel extérieur $V_1(\mathbf{r}, t)$ est remplacé par sa somme avec le potentiel local d'interaction $gn(\mathbf{r}, t)$, ce qui change peu la forme des équations mais peut introduire des effets physiques complètement nouveaux du fait de la non-linéarité ainsi introduite.

3. Ecoulements métastables, superfluidité

Considérons maintenant une situation où un ensemble de bosons répulsifs est contenu dans une boîte torique de révolution autour de l'axe Oz (Figure 2); peu importe pour notre raisonnement que la section du tore soit circulaire, rectangulaire, ou autre; nous utiliserons des coordonnées cylindriques r , φ et z . Dans un premier temps, nous introduirons des solutions de l'équation de Gross-Pitaevskii qui correspondent, dans cette géométrie, à des mouvements de rotation autour de Oz du système physique à l'intérieur de la boîte torique. Puis nous montrerons que ces états de rotation sont métastables, ne pouvant relaxer vers des états de rotation plus faible sans franchir une barrière énergétique macroscopique, ce qui explique l'origine physique de la superfluidité.

3-a. Géométrie torique, quantification de la circulation, vortex

Pour éviter toute confusion avec l'angle azimuthal φ , nous notons maintenant χ la fonction d'onde de Gross-Pitaevskii. L'équation de Gross-Pitaevskii indépendante du temps devient alors (en l'absence de tout autre potentiel que celui des parois de la boîte) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \chi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} \right] + g |\chi(\mathbf{r})|^2 \chi(\mathbf{r}) = \mu \chi(\mathbf{r}) \quad (58)$$

1. C'est un terme de "dérivée totale" (dérivée accompagnant le mouvement de chaque particule dans un fluide). Un calcul simple d'analyse vectorielle, combiné au fait que le rotationnel de la vitesse est nul selon (51), montre que ce terme est égal à $m(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}$; il peut donc être incorporé en remplaçant au premier membre de (57) la dérivée partielle $\partial/\partial t$ par la dérivée totale $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla$.

2. Le potentiel quantique est également présent pour une particule unique. On constate en effet qu'il ne disparaît pas dans (57) si l'on annule dans cette relation la constante de couplage g . Or, pour $g = 0$, l'équation de Gross-Pitaevskii se réduit à l'équation de Schrödinger standard, valable pour une particule unique.

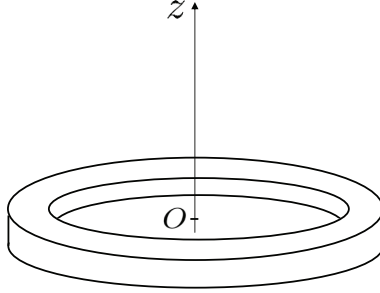


FIGURE 2 – Un gaz de bosons répulsifs est contenu dans une boîte torique d’axe Oz . Initialement, on suppose que tous les bosons sont dans un même état quantique impliquant une rotation autour de cet axe. On montre dans le texte que, pour amortir cette rotation, le système physique doit franchir une barrière de potentiel provenant de la répulsion entre particules. Ceci empêche l’amortissement de produire le moindre effet observable sur toute échelle de temps accessible ; on observe donc un fluide tournant indéfiniment, et on dit que le système est superfluide.

Cherchons des solutions de la forme :

$$\chi_l(\mathbf{r}) = u_l(r, z)e^{il\varphi} \quad (59)$$

où l est nécessairement un nombre entier (sinon la fonction d’onde serait multivaluée). Une telle solution possède un moment cinétique dont la composante le long de Oz est bien définie, égale à $l\hbar$ par atome. Reportant cette expression dans (58), nous obtenons alors l’équation en $u_l(r, z)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_l(r, z)}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u_l(r, z)}{\partial z^2} \right] + \left[g |u_l(r, z)|^2 + \frac{l^2 \hbar^2}{2mr^2} \right] u_l(r, z) = \mu u_l(r, z) \quad (60)$$

qui doit être résolue avec les conditions aux limites imposées par la forme du tore pour obtenir l’état fondamental (associé à la valeur la plus basse de μ). Le terme en $l^2 \hbar^2 / 2mr^2$ correspond simplement à l’énergie cinétique de rotation autour de Oz . Si le rayon R du tore est très grand devant la dimension de sa section, on peut avec une bonne approximation remplacer le terme l^2 / r^2 par une constante l^2 / R^2 ; on voit alors que la même solution de (60) convient pour toutes les valeurs de l à condition d’augmenter le potentiel chimique de cette constante. Chaque valeur du moment cinétique donne ainsi lieu à un état fondamental, dont le potentiel chimique est d’autant plus élevé que l est plus grand. L’équation étant à coefficients réels, nous supposons dans toute la suite que les fonctions $u_l(r, z)$ sont réelles.

Compte tenu de la forme (59) de la fonction d’onde, dont la phase ne dépend que de φ , l’expression (51) de la vitesse du fluide s’écrit :

$$\mathbf{v} = \frac{1}{r} \frac{l\hbar}{m} \mathbf{e}_\varphi \quad (61)$$

où \mathbf{e}_φ est le vecteur unitaire tangentiel (perpendiculaire à \mathbf{r} et à l'axe Oz). Le fluide tourne donc le long du tube torique à une vitesse proportionnelle à l . Comme \mathbf{v} est un gradient, son intégrale de circulation le long d'un chemin fermé équivalent à zéro (continûment déformable en un chemin nul) est nulle. Si le circuit fermé fait un tour dans le tore, le chemin n'est plus équivalent à zéro, et sa circulation peut être calculée sur un cercle où r et z restent constants, et où φ varie de 0 à 2π ; la longueur du chemin valant $2\pi r$, on obtient :

$$\int \mathbf{v} \cdot d\mathbf{s} = \pm l \frac{2\pi\hbar}{m} \quad (62)$$

(avec un signe + si le tour est fait dans le sens trigonométrique, et - s'il est fait dans le sens inverse). Comme l est un nombre entier, la circulation de la vitesse autour du centre du tore est quantifiée en unités de \hbar/m , ce qui est évidemment une propriété purement quantique (pour un fluide classique, cette circulation peut prendre un ensemble continu de valeurs).

Pour simplifier les calculs, nous avons supposé dans ce qui précède que la rotation du fluide s'effectue en bloc à l'intérieur d'un anneau torique. Mais, bien évidemment, des déplacements plus complexes du fluide sont également possibles, mettant en jeu des géométries différentes. Un cas important, et sur lequel nous reviendrons plus bas, est celui où la rotation s'effectue autour d'un axe encore parallèle à Oz , mais qui passe maintenant à l'intérieur du fluide. La fonction d'onde de Gross-Pitaevskii doit alors s'annuler le long d'une ligne au sein même du fluide, qui contient dans ce cas une ligne singulière. Il s'ensuit que la phase peut effectuer une rotation de 2π autour de cette ligne. Cette situation correspond à ce que l'on appelle un "vortex", petit tourbillon de rotation du fluide autour de la ligne singulière appelée "cœur du vortex". Comme la circulation de la vitesse ne dépend que de la variation de la phase le long du chemin qui fait le tour du cœur du vortex, la relation de quantification (62) reste valable. Historiquement, c'est d'ailleurs dans le cadre de l'étude des vortex dans un superfluide et de la quantification de leur circulation que l'équation de Gross-Pitaevskii a été introduite.

3-b. Barrière de potentiel répulsive

Un fluide classique en rotation tend toujours à s'immobiliser au bout d'un certain temps, sous l'effet de la dissipation visqueuse qui se produit aux parois. Dans un tel processus, l'énergie cinétique macroscopique de rotation d'ensemble du fluide se dégrade progressivement en de nombreuses excitations à plus petite échelle, qui finissent par créer un simple échauffement du fluide. On peut alors se demander si un fluide quantique de bosons répulsifs en rotation, décrit par une fonction d'onde $\chi_l(\mathbf{r})$, se comporte de même : va-t-il transiter successivement vers l'état $\chi_{l-1}(\mathbf{r})$, puis $\chi_{l-2}(\mathbf{r})$, etc., jusqu'à finir par s'immobiliser dans l'état $\chi_0(\mathbf{r})$?

Nous avons vu au § 4-c du Complément C_{XV} que, pour éviter le coût en énergie lié à la fragmentation, le système doit rester à tout instant dans un état où toutes les particules occupent le même état quantique; ceci justifie l'utilisation de l'équation de Gross-Pitaevskii (18).

$\alpha.$ Une géométrie simple

Supposons tout d'abord que la fonction d'onde $\chi(\mathbf{r}, t)$ passe continûment de $\chi_l(\mathbf{r})$ à $\chi_{l'}(\mathbf{r})$ selon :

$$\chi(\mathbf{r}, t) = c_l(t) \chi_l(\mathbf{r}) + c_{l'}(t) \chi_{l'}(\mathbf{r}) \quad (63)$$

où $c_l(t)$ décroît dans le temps d'une valeur de module 1 vers 0, tandis que $c_{l'}(t)$ fait l'inverse. La normalisation impose que, à tout instant t :

$$|c_l(t)|^2 + |c_{l'}(t)|^2 = 1 \quad (64)$$

Dans un tel état, il apparaît une dépendance de la densité numérique $n(r, \varphi, z; t)$ en fonction de φ (alors que ce n'était pas le cas pour aucun des états l ou l' séparément). En revanche, la dépendance transversale de la densité en fonction des variables r et z n'est guère affectée³. En effet, les variations de $n(r, \varphi, z; t)$ sont données par :

$$\begin{aligned} n(r, \varphi, z; t) &= \left| c_l(t) u_l(r, z) e^{il\varphi} + c_{l'}(t) u_{l'}(r, z) e^{il'\varphi} \right|^2 \\ &= |c_l(t)|^2 |u_l(r, z)|^2 + |c_{l'}(t)|^2 |u_{l'}(r, z)|^2 \\ &\quad + c_l(t) c_{l'}^*(t) u_l(r, z) u_{l'}(r, z) e^{i(l-l')\varphi} + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (65)$$

où c.c. symbolise le complexe conjugué du terme précédent. Les deux premiers termes sont indépendants de φ , et conduisent à une simple moyenne pondérée entre les densités associées à chacun des deux états l et l' . Le dernier terme oscille en fonction de φ avec une amplitude $|c_l(t)| \times |c_{l'}(t)|$, qui n'est nulle que si l'un des deux coefficients $c_l(t)$ ou $c_{l'}(t)$ l'est. Si φ_l est la phase du coefficient $c_l(t)$, ce dernier terme est proportionnel à :

$$c_l(t) c_{l'}^*(t) e^{i(l-l')\varphi} + \text{c.c.} = 2 |c_l(t)| \times |c_{l'}(t)| \cos[(l-l')\varphi + \varphi_l - \varphi_{l'}] \quad (66)$$

Quelles que soient les phases des deux coefficients $c_l(t)$ et $c_{l'}(t)$, le cosinus oscille toujours entre -1 et 1 en fonction de φ : en ajustant ces phases, on peut certes déplacer à loisir la valeur de φ rendant la densité maximale (ou minimale), mais ce maximum (et ce minimum) se produisent toujours quelque part sur le cercle. La superposition d'états introduit donc nécessairement une modulation de la densité.

Évaluons maintenant les conséquences de cette modulation de densité sur l'énergie d'interaction répulsive interne du fluide. Pour l'énergie d'interaction, comme en (15) nous utilisons l'approximation du potentiel d'interaction de portée nulle et la reportons dans l'expression (15) du Complément C_{XV} ; nous obtenons alors, compte tenu de la normalisation (17) de la fonction d'onde :

$$\left\langle \widehat{W}_2 \right\rangle_x = \frac{g}{2} \int d^3r |\chi(\mathbf{r}, t)|^4 = \frac{g}{2} \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^{+\infty} dz [n(r, \varphi, z; t)]^2 \quad (67)$$

Nous devons maintenant reporter le carré de (65) dans cette expression, ce qui fait apparaître divers termes. Le premier, en $|c_l(t)|^4$, introduit la contribution :

$$|c_l(t)|^4 \left\langle \widehat{W}_2 \right\rangle_l \quad (68)$$

3. Elle ne l'est pas du tout si nous supposons que les fonctions $u_l(r, z)$ et $u_{l'}(r, z)$ sont égales.

où $\langle \widehat{W}_2 \rangle_l$ est l'énergie d'interaction pour l'état $\chi_l(\mathbf{r})$; le second est le terme semblable pour l' , et le troisième un terme croisé en $2 |c_l(t)|^2 |c_{l'}(t)|^2$. Si, pour simplifier, nous supposons que les densités associées aux deux états l et l' sont pratiquement les mêmes, nous obtenons pour la somme de ces trois termes :

$$\left[|c_l(t)|^2 + |c_{l'}(t)|^2 \right]^2 \langle \widehat{W}_2 \rangle_l = \langle \widehat{W}_2 \rangle_l \quad (69)$$

Jusqu'ici, la superposition n'a aucun effet sur l'énergie de répulsion interne. Les termes croisés entre les termes indépendants de φ dans (65) et les termes en $e^{\pm i(l-l')\varphi}$ s'annulent par intégration sur φ . Enfin restent les termes croisés en $e^{\pm i(l-l')\varphi} \times e^{\mp i(l-l')\varphi}$, dont l'intégrale sur φ conduit à :

$$2 |c_l(t)|^2 |c_{l'}(t)|^2 |u_l(r, z)|^2 |u_{l'}(r, z)|^2 \quad (70)$$

Si, à nouveau, nous supposons que les densités associées aux états l et l' sont pratiquement les mêmes, nous obtenons par intégration sur r et z :

$$2 |c_l(t)|^2 |c_{l'}(t)|^2 \langle \widehat{W}_2 \rangle_l \quad (71)$$

soit, par somme avec (69) :

$$\langle \widehat{W}_2 \rangle_x = \left[1 + 2 |c_l(t)|^2 |c_{l'}(t)|^2 \right] \langle \widehat{W}_2 \rangle_l \quad (72)$$

Nous voyons ainsi que la modulation de la densité associée à la superposition d'états augmente toujours l'énergie de répulsion interne : certes, cette modulation conduit à une diminution d'énergie dans la région de faible densité, mais également une augmentation dans la région de haute densité, qui l'emporte sur la diminution (car l'énergie de répulsion est une fonction quadratique de la densité). L'énergie interne peut ainsi varier entre $\langle \widehat{W}_2 \rangle_l$ et un maximum de $(3/2) \langle \widehat{W}_2 \rangle_l$, obtenu lorsque $c_l(t)$ et $c_{l'}(t)$ sont tous deux égaux à $1/\sqrt{2}$ en module.

β. Autres géométries, différents canaux de relaxation

Il existe bien d'autres façons dont la fonction d'onde de Gross-Pitaevskii peut passer d'un état de rotation à un autre : nous n'avons étudié que la géométrie la plus simple afin d'introduire la notion de barrière de potentiel avec le minimum de calculs, mais rien n'interdit au fluide de passer par des états intermédiaires de géométries plus compliquées. Un cas fréquent est celui de la création sur les parois d'un vortex, petit tourbillon dont nous avons brièvement discuté l'existence à la fin du § 3-a ; un vortex introduit une rotation de la phase de 2π autour d'une ligne singulière où s'annule la fonction d'onde. Une fois qu'il est créé, et contrairement à ce qui était le cas en (62), la circulation de la vitesse dans le fluide n'est plus indépendante du chemin d'intégration qui fait le tour du tore : elle diffère maintenant de $2\pi\hbar/m$ selon le côté du vortex où passe le chemin. De plus, lorsque le vortex se déplace dans le fluide d'une paroi à l'autre, on montre que la proportion du fluide qui conserve la circulation initiale diminue en faveur de celle qui a une circulation où le nombre quantique l a changé d'une unité. Ce déplacement change donc progressivement le

moment cinétique de rotation ; une fois que le vortex a disparu sur l'autre paroi, le résultat final est une diminution d'une unité du nombre quantique l associé à la rotation du fluide.

Le passage continu de vortex d'une paroi à l'autre fournit ainsi un autre "canal de relaxation" qui permet au moment cinétique du fluide de diminuer. Toutefois, la création d'un vortex implique nécessairement l'apparition d'une densité non uniforme du fluide décrite par l'équation de Gross-Pitaevskii (cette densité doit s'annuler au cœur du vortex). Elle s'accompagne donc comme plus haut d'une augmentation de l'énergie moyenne de répulsion entre les particules (énergie élastique du fluide). Il en résulte à nouveau l'existence d'une barrière d'énergie associée au processus (nous revenons plus en détail sur ce point dans la conclusion). En d'autres termes, la création et le déplacement de vortex fournissent un autre "canal de relaxation" de la vitesse du fluide, avec une barrière et donc un temps de relaxation qui lui sont propres.

Il est clair qu'on peut également imaginer d'autres géométries pour la modification de l'écoulement du fluide. Chacune d'entre elles est associée à une barrière de potentiel et donc à une certaine durée de vie. C'est le canal de relaxation de plus courte durée de vie qui va principalement déterminer l'amortissement de la vitesse, qui peut dans certains cas prendre un temps énorme (des dizaines d'années ou bien plus) et justifier ainsi le nom de "superfluide".

3-c. Vitesse critique, métastabilité de l'écoulement

Pour simplifier, nous allons mener la discussion dans le cadre de la géométrie simple du § 3-a. Cette discussion se transposerait cependant directement à d'autres géométries, par exemple à la création de vortex dans le fluide, le changement principal étant celui de la hauteur de la barrière d'énergie⁴.

Dans le cadre de cette géométrie simple, le terme qui joue le rôle de potentiel dans l'équation (60) est la somme d'un potentiel répulsif $g|u_l(r, z)|^2$ et d'une énergie cinétique de rotation autour de Oz égale à $l^2\hbar^2/2mr^2$. Dans un état de l donné, ces deux contributions s'expriment en fonction de deux vitesses. En effet, la relation (61) permet d'obtenir la vitesse de rotation v_l associée à l'état l , qui vaut :

$$v_l = \frac{1}{r} \frac{l\hbar}{m} \quad (73)$$

et l'énergie de rotation s'écrit alors simplement :

$$\langle E_{rot} \rangle_l = \frac{l^2\hbar^2}{2mr^2} = \frac{1}{2}m(v_l)^2 \quad (74)$$

Quant au terme d'interaction (terme en g au premier membre), nous pouvons l'écrire sous une forme plus commode en appelant comme plus haut n_0 la densité numérique :

$$n_0 = |u_l(r, z)|^2 \quad (75)$$

et en y insérant la définition (39) de la vitesse du son c . Il prend alors une forme analogue à (74) :

$$gn_0 = mc^2 \quad (76)$$

4. Lorsque plusieurs canaux de relaxation sont disponibles, c'est celui associé à la barrière la plus basse qui va dominer l'évolution.

Les deux vitesses v_l et c permettent donc d'évaluer commodément l'importance respective des énergies cinétique et potentielle dans un état l .

Comparons maintenant les contributions de ces deux termes, soit dans des états de l donné, soit dans une superposition (63). Pour rendre la discussion plus concrète et tracer une figure, utilisons une variable continue; nous prendrons la moyenne $\langle J_z \rangle$ de la composante du moment cinétique le long de Oz :

$$\langle J_z \rangle = l\hbar |c_l(t)|^2 + l'\hbar |c_{l'}(t)|^2 \quad (77)$$

Cette expression varie continûment entre $l\hbar$ et $l'\hbar$ lorsque l'on change le poids relatif de $|c_l(t)|^2$ et $|c_{l'}(t)|^2$, tout en respectant la relation (64); la variable continue :

$$x = \langle J_z \rangle / \hbar \quad (78)$$

permet donc d'interpoler entre les valeurs discrètes entières de l .

La relation (64) de normalisation de la fonction d'onde (63) permet d'exprimer x en fonction de $|c_l(t)|^2$:

$$x = (l - l') |c_l(t)|^2 + l' \quad (79)$$

La variable x peut être considérée comme une caractérisation du module des deux composantes d'une fonction d'onde variationnelle (63); une seconde variable est nécessaire pour définir la phase relative de ses deux coefficients, qui intervient par exemple dans (66). On peut étudier l'évolution du vecteur d'état au sein de cette famille variationnelle. Nous nous contenterons cependant d'un raisonnement qualitatif, pour plusieurs raisons. En premier lieu, il n'est pas aisé de caractériser exactement le couplage entre le fluide et l'extérieur par un hamiltonien susceptible de changer son moment cinétique de rotation (par exemple les effets des irrégularités des parois, qui transfèrent de l'énergie et du moment cinétique au récipient). De plus, l'équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps est non linéaire, de sorte que sa résolution précise relève plutôt d'un calcul numérique. C'est pourquoi nous nous limiterons à discuter de façon qualitative les effets de la barrière de potentiel obtenue au § 3-b, barrière qui s'oppose d'autant plus efficacement au passage de $x = l$ à $x = l'$ qu'elle est élevée. Evaluons donc les variations de l'énergie moyenne en fonction de x .

Pour l'énergie cinétique moyenne de rotation, lorsque x est entier, elle varie quadratiquement en x comme l'indique (74); entre ces valeurs elle s'interpole de la même façon que (77). En ce qui concerne l'énergie potentielle, nous avons vu qu'une variation continue de $c_l(t)$ et $c_{l'}(t)$ implique nécessairement une superposition cohérente qui ne peut se faire qu'au prix d'une augmentation de l'énergie potentielle répulsive; cette dernière est multipliée par $3/2$ lorsque les deux coefficients $c_l(t)$ et $c_{l'}(t)$ sont égaux en module (c'est-à-dire lorsque x prend une valeur entière plus $1/2$). Ainsi, à la variation quadratique d'énergie cinétique de rotation se superpose une variation d'énergie potentielle oscillante, minimale pour toutes les valeurs entières de x , mais maximale à mi-chemin entre les deux; l'amplitude de cette oscillation est :

$$\frac{gn_0}{2} = \frac{1}{2}mc^2 \quad (80)$$

La Figure 3 représente trois courbes donnant la variation d'énergie du système en fonction de la valeur moyenne $\langle J_z \rangle$. La plus basse, en pointillés, correspond à

une superposition de l'état l avec l'état $l' = l - 1$, dans un cas où la constante de couplage g est très petite (interactions très faibles, gaz presque parfait). Selon (39), la vitesse du son est également très faible, de sorte qu'on se trouve dans le cas $c \ll v_l$; la comparaison entre (74) et (80) montre alors que la contribution de l'énergie potentielle est négligeable devant la variation d'énergie cinétique de rotation entre les deux états. Il en découle que la modulation de la courbe de la figure 3 est à peine perceptible, de sorte que la courbe ne possède alors qu'un seul minimum en $x = 0$: quel que soit l'état de rotation initial, aucune barrière de potentiel n'empêche la vitesse de rotation du fluide de relaxer vers zéro (par exemple sous l'effet des interactions avec des irrégularités des parois contenant le fluide).

Les deux autres courbes correspondent à un cas où g est bien plus grand, donc selon (39) c bien plus élevé; il existe alors plusieurs valeurs de l pour lesquelles v_l est petit devant c . La courbe en tirets correspond, comme la précédente, à une superposition entre les deux états $l = 1$ et $l' = l - 1$; celle en traits pleins (pour la même valeur de g) à une superposition des $l = 3$ et $l' = 0$, correspondant au cas où le système passe directement de l'état $l = 3$ à l'état fondamental de la rotation dans le tore $l' = 0$. On remarque immédiatement que c'est cette dernière courbe qui présente la barrière la plus basse depuis $l = 3$ (cercle sur la figure); c'est naturel puisque c'est elle qui implique la plus grande variation d'énergie cinétique, allant en sens opposé à la variation d'énergie potentielle. C'est donc le passage direct de $l = 3$ à $l' = 0$ qui va déterminer la possibilité (ou non) pour le système de relaxer vers un état de rotation plus lente. A nouveau, nous utilisons (74) et (80) pour comparer la variation d'énergie cinétique et la hauteur de la barrière de potentiel répulsif. Tous les états l de vitesses v_l très supérieures à c ont une énergie cinétique excédant largement la hauteur du maximum d'énergie potentielle moyenne, ce qui empêche l'apparition d'une barrière. En revanche, tous les états l de vitesse v_l très inférieure à c ne peuvent diminuer leur état de rotation sans franchir une barrière de potentiel.

Entre ces deux cas extrêmes, il existe donc (pour g donné) une valeur "critique" de l_c correspondant à l'apparition de la barrière; il lui correspond une "vitesse critique" $v_c = l_c \hbar / mr$, de l'ordre de la vitesse du son c , fixant la valeur maximale de v_l pour laquelle cette barrière de potentiel existe. Si la vitesse de rotation du fluide dans le tore est supérieure à v_c , le liquide peut ralentir sa rotation sans franchir de barrière, et la dissipation se produit comme dans un liquide visqueux ordinaire – on dit alors que c'est un fluide "normal". En revanche, si la vitesse du fluide est inférieure à la vitesse critique, le système physique doit nécessairement franchir une barrière de potentiel pour aller continûment vers $l = 0$. Or cette barrière est macroscopique, puisqu'elle résulte de la répulsion entre toutes les particules et leurs voisines. Certes, en principe toute barrière peut être franchie, soit par excitation thermique, soit par effet tunnel quantique. Cependant, le temps requis pour ce passage peut prendre une valeur gigantesque : d'une part, il est très peu probable qu'une fluctuation thermique atteigne une valeur d'énergie macroscopique; d'autre part, la probabilité d'un effet tunnel quantique décroît exponentiellement lorsque la hauteur de la barrière augmente, et devient très faible s'il s'agit du passage tunnel d'un objet macroscopique. Les temps de relaxation de la vitesse du fluide peuvent donc atteindre des valeurs extrêmement grandes, de sorte qu'à échelle humaine on peut considérer que la rotation dure indéfiniment. Ce phénomène porte le nom de "superfluidité".

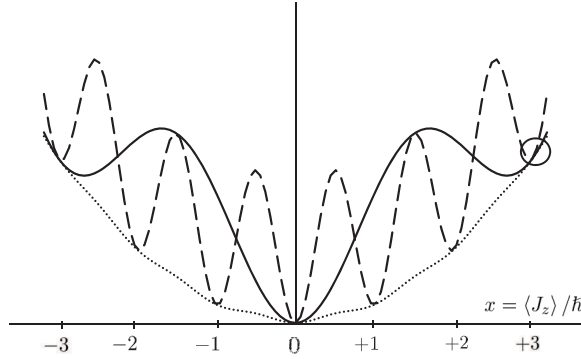


FIGURE 3 – Représentation de l'énergie d'un système de bosons répulsifs en rotation et dans une superposition cohérente de l'état l et de l'état l' , en fonction du moment cinétique moyen $\langle J_z \rangle$ du système exprimé en unités de \hbar . La courbe basse en pointillés correspond au cas $l' = l - 1$ et où la constante d'interaction g est faible (gaz presque parfait); l'énergie potentielle est alors négligeable de sorte que l'énergie totale a l'allure représentée, avec un seul minimum en $\langle J_z \rangle = 0$. Il s'ensuit que, quel que soit l'état initial de rotation du fluide, il va relaxer vers un état immobile $l = 0$ sans franchir aucune barrière de potentiel, et donc dissiper son énergie cinétique de rotation; il se comporte en fluide normal. Les deux autres courbes représentent une situation où g est plus grand – donc selon (39) où c est bien plus élevé; la courbe en tiretés correspond toujours à une superposition des états de rotation l et $l' = l - 1$, et la courbe en trait plein à la superposition directe de l'état $l = 3$ (représenté par un cercle sur la figure) avec l'état fondamental $l' = 0$. C'est la courbe en trait plein qui présente la barrière la moins haute; c'est donc elle qui détermine la métastabilité de l'écoulement.

Les états l présentant un minimum de potentiel sont d'autant plus nombreux que la constante de couplage g est plus grande. Ce sont ceux dont la vitesse d'écoulement dans le tore est inférieure à la vitesse critique; pour passer de l'état de rotation $l = 1$ à celui au repos $l = 0$, le système doit alors franchir une barrière de potentiel macroscopique, ce qu'il ne peut faire qu'avec une probabilité tellement faible qu'on peut la considérer comme nulle. Le courant de rotation est alors permanent, pouvant durer des années, et on dit que le système est superfluide. En revanche, les états de l encore plus élevés pour lesquels la courbe n'a aucun minimum correspondent à un fluide normal, dont la rotation peut ralentir sous l'effet de la viscosité (dissipation de l'énergie cinétique en chaleur).

3-d. Généralisation ; aspect topologique

Notre raisonnement est resté qualitatif pour plusieurs raisons. En premier lieu, il montre l'existence d'une vitesse critique v_c dans le fluide, de l'ordre de c , mais ne donne pas précisément sa valeur ; pour ce faire, il faudrait étudier plus en détail la forme des courbes de potentiel telles que celles de la figure 3, et obtenir la valeur exacte des paramètres pour laquelle la barrière de potentiel apparaît ou disparaît. De plus, et comme nous l'avons déjà noté, il faudrait prendre en compte d'autres déformations possibles de la fonction d'onde ; il n'existe aucune raison particulière de se limiter, comme nous l'avons fait, à des géométries simples décrites par la seule variable φ . Il peut en effet se produire des situations variées, comme la création de vortex, ou de façon générale des processus plus compliqués qui demanderaient une étude plus élaborée sur le plan mathématique que celle que nous avons présentée. En d'autres termes, il faudrait prendre en compte l'existence d'autres canaux de relaxation du fluide en mouvement vers le repos, et rechercher quel est celui qui conduit à la barrière la plus faible – donc celui qui détermine la durée de vie de l'écoulement superfluide.

Il existe cependant une façon plus générale de raisonner qui permet de voir que l'essentiel de nos conclusions n'est pas limité au cas particulier que nous avons étudié. Ce raisonnement se base sur les propriétés topologiques de la phase de la fonction d'onde. En effet, lorsque la phase augmente de $2l\pi$ lors d'un tour dans le tore, il s'agit d'une propriété topologique caractérisée par un nombre d'enroulement l , nombre entier qui ne peut varier continûment. C'est pourquoi, tant que la phase reste bien définie en tout point – c'est-à-dire tant que la fonction d'onde ne s'annule pas – il est impossible de passer continûment de l à $l \pm 1$. C'est d'ailleurs ce que l'on vérifie sur l'exemple particulier de la fonction d'onde (63) : lorsque $c_l(t)$ décroît dans le temps d'une valeur de module 1 vers 0, tandis que $c_{l'}(t)$ fait l'inverse, il faut nécessairement passer par une situation où la fonction d'onde s'annule par interférence dans un plan défini par une valeur de φ ; la phase de la fonction d'onde n'est pas définie dans ce plan, et effectue un saut discontinu lors de la traversée de ce plan. Or l'annulation de la fonction d'onde commune à un grand nombre de bosons condensés signifie l'annulation de la densité en ce point, qui se traduit automatiquement par une augmentation en d'autres points de l'espace. Cette variation spatiale de densité entraîne nécessairement une augmentation de l'énergie, du fait de la compressibilité finie du fluide : comme au § 3-b, l'augmentation de l'énergie dans les régions de forte densité surpasse la diminution dans celles de basse densité. Il existe en conséquence une barrière énergétique qui s'oppose au changement du nombre d'enroulement l de la phase. Il faut alors comparer la variation de l'énergie cinétique à la hauteur de cette barrière de potentiel. Comme plus haut, on trouve alors qu'un changement radical du régime d'écoulement se produit selon que la vitesse du fluide prend une valeur inférieure ou supérieure à une certaine vitesse critique v_c : dans le premier cas, la superfluidité permet un écoulement sans dissipation qui dure presque indéfiniment ; dans le second, aucun argument énergétique ne s'oppose à l'apparition d'une dissipation, et la rotation se ralentit progressivement comme dans un liquide ordinaire.

L'idée essentielle à retenir est donc que ce sont les interactions répulsives qui sont à l'origine de la superfluidité, et ceci pour deux raisons. La première raison est la présence de cette barrière énergétique qui induit la métastabilité. La seconde, peut-

être plus essentielle encore, est que les effets de la répulsion entre bosons tendent constamment à mettre toutes les particules du fluide dans le même état quantique – cf. § 4.c du Complément C_{XV} ; sans cette propriété, nous n'aurions pas pu caractériser les états intermédiaires de rotation aussi simplement que par la fonction d'onde (63). L'existence de cette fonction d'onde implique que le fluide quantique n'a accès qu'à un nombre d'états extrêmement limité par rapport à une situation où les particules ne seraient pas identiques ; il ne peut alors pas dissiper son énergie cinétique en chaleur, comme le ferait un fluide classique, et maintient donc sa rotation pendant des temps tellement longs qu'un ralentissement devient en pratique totalement inobservable.

Complément E_{XV}

Systèmes de fermions, approximation de Hartree-Fock

1	Les bases de la méthode	96
1-a	Famille d'essai et hamiltonien	97
1-b	Valeur moyenne de l'énergie	98
1-c	Optimisation de la fonction d'onde variationnelle	100
1-d	Formulation équivalente de la stationnarité de l'énergie moyenne	103
1-e	Energie variationnelle	104
1-f	Equations de Hartree-Fock	105
2	Généralisation : méthode opératorielle	107
2-a	Energie moyenne	108
2-b	Optimisation de l'opérateur densité à une particule	111
2-c	Opérateur de champ moyen	113
2-d	Equations de Hartree-Fock pour des électrons	114
2-e	Discussion	117

Introduction

Le calcul des niveaux d'énergie d'un système de N électrons interagissant entre eux par la force de Coulomb et placés dans un potentiel extérieur $V_1(\mathbf{r})$ est un problème très important en physique et en chimie. Il se pose pour déterminer les niveaux d'énergie des atomes (cas où le potentiel extérieur auquel sont soumis les électrons¹ est constitué par le potentiel coulombien du noyau $-Zq^2/4\pi\epsilon_0 r$), mais aussi des molécules, des électrons dans un solide (où ils sont soumis à un potentiel périodique), dans un agrégat ou un nanocristal, etc. C'est un problème où deux ingrédients jouent simultanément un rôle essentiel : le caractère fermionique des électrons, qui leur interdit d'occuper le même état individuel, et les effets de leurs interactions mutuelles. Si l'on pouvait ignorer la répulsion coulombienne entre électrons, le calcul deviendrait alors relativement simple, et rappellerait celui du § 1 du Complément C_{XIV} concernant des fermions libres dans une boîte ; il suffirait de remplacer les états individuels des ondes planes libres par les états propres d'énergie d'une particule unique se déplaçant dans le potentiel $V_1(\mathbf{r})$. Ceci demanderait la résolution d'une équation de Schrödinger à 3 dimensions, ce qui est accessible avec une très bonne précision, même si ce n'est pas toujours possible analytiquement.

Mais, que ce soit dans les atomes ou les solides, la répulsion entre électrons joue un rôle essentiel : l'oublier conduirait par exemple à conclure que la taille des atomes diminue quand Z augmente sous l'effet de l'attraction du noyau, alors que

1. Nous nous plaçons dans l'approximation où le rapport entre la masse du noyau et celle d'un électron est considéré comme infini. On peut alors étudier le système électronique en considérant la position du noyau comme fixe et placée à l'origine.

c'est l'inverse qui est vrai² ! Lorsque N particules interagissent, un calcul exact demanderait de résoudre une équation de Schrödinger dans un espace de dimension $3N$, même sans tenir compte du spin ; or c'est impossible lorsque N devient grand, même avec des ordinateurs très puissants. Il faut donc recourir à des méthodes d'approximation, dont la plus courante est la méthode de Hartree-Fock, qui ramène le problème à la solution d'une série d'équations à 3 dimensions ; c'est elle que nous exposons dans ce complément, où nous supposons que les particules étudiées sont des fermions.

La méthode de Hartree-Fock est basée sur l'approximation variationnelle (Complément E_{XI}), c'est-à-dire sur le choix d'une famille d'essai de vecteurs d'état parmi lesquels on sélectionne celui qui minimise l'énergie moyenne ; la famille choisie est celle de tous les états de Fock possibles décrivant l'ensemble des N fermions. Cette approche permet d'introduire et de calculer le champ moyen "autocoherent" dans lequel se déplace chacun des électrons, compte tenu de la répulsion introduite par les autres électrons, et de justifier la méthode du champ central discutée au Complément A_{XIV}. La méthode s'applique, non seulement à l'état fondamental, mais également à tous les états stationnaires des atomes. Elle peut se généraliser à de nombreux autres cas, par exemple aux molécules, ou encore au calcul de l'état fondamental et des états excités des noyaux, qui sont des systèmes liés de protons et de neutrons.

Ce complément présente la méthode de Hartree-Fock en deux temps, en commençant au § 1 par une approche simple en termes de fonctions d'onde, puis en la généralisant au § 2 en notations de Dirac et en termes de projecteurs ; le lecteur pourra, selon sa préférence, passer par les deux étapes ou aller directement à la seconde. Dans le § 1, nous supposons les particules sans spin, ce qui permet de discuter les idées physiques principales et d'introduire la notion de champ moyen avec un minimum de complications. Dans le § 2, nous prenons un point de vue plus général qui permet de préciser un certain nombre de points et d'introduire la notion d'hamiltonien effectif de Hartree-Fock à une particule, avec ou sans spin ; avec cet hamiltonien, l'interaction avec les autres particules est traitée par un opérateur de champ moyen. Pour plus de détails sur les méthodes de Hartree-Fock, et en particulier leurs relations avec le théorème de Wick, le lecteur pourra consulter les Chapitres 7 et 8 de la référence [5].

1. Les bases de la méthode

Commençons par exposer les bases de la méthode de Hartree-Fock dans un cas simple, celui où les particules sont sans spin (ou toutes dans le même état individuel de spin), de sorte qu'un nombre quantique de spin n'est pas nécessaire pour définir un état quantique individuel ; il suffit de spécifier une fonction d'onde. Dans ce cadre, nous commençons par introduire les notations et définir la famille d'essai des vecteurs d'état à N particules.

2. Le principe d'exclusion de Pauli ne suffit pas à expliquer que la dimension des atomes augmente avec le numéro atomique Z . On peut évaluer la taille approximative d'un atome hypothétique dont les électrons n'interagiraient pas (on considère que la taille de l'atome est celle de l'orbite la plus externe occupée par un des électrons). Le rayon de Bohr a_0 varie en $1/Z$, alors que la valeur la plus élevée du nombre quantique principal n des états occupés varie approximativement en $Z^{1/3}$. La taille $n^2 a_0$ en question varie donc à peu près comme $Z^{-1/3}$.

1-a. Famille d'essai et hamiltonien

Nous prenons comme famille d'essai pour l'état du système à N fermions l'ensemble de ceux qui peuvent s'écrire sous la forme :

$$|\widetilde{\Psi}\rangle = a_{\theta_1}^\dagger a_{\theta_2}^\dagger \dots a_{\theta_N}^\dagger |0\rangle \quad (1)$$

où $a_{\theta_1}^\dagger, a_{\theta_2}^\dagger, \dots, a_{\theta_N}^\dagger$ sont les opérateurs de création associés à une série d'états individuels $|\theta_1\rangle, |\theta_2\rangle, \dots, |\theta_N\rangle$, normés et tous orthogonaux entre eux (donc tous distincts); l'état $|\widetilde{\Psi}\rangle$ est alors normé à 1. Cette série d'états individuels est pour l'instant arbitraire; le but du calcul variationnel qui va suivre est précisément de la déterminer.

Pour des particules sans spin, la fonction d'onde correspondante $\widetilde{\Psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ s'écrit alors sous la forme d'un déterminant de Slater (Chapitre XIV, § C.3.c.β) :

$$\widetilde{\Psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \theta_1(\mathbf{r}_1) & \theta_2(\mathbf{r}_1) & \dots & \theta_N(\mathbf{r}_1) \\ \theta_1(\mathbf{r}_2) & \theta_2(\mathbf{r}_2) & \dots & \theta_N(\mathbf{r}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \theta_1(\mathbf{r}_N) & \theta_2(\mathbf{r}_N) & \dots & \theta_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2)$$

L'hamiltonien du système est la somme de l'énergie cinétique, de l'énergie potentielle à un corps, et de l'énergie d'interaction :

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}_{\text{ext}} + \widehat{W}_{\text{int}} \quad (3)$$

Le premier terme, \widehat{H}_0 , est l'opérateur associé à l'énergie cinétique des fermions, somme des énergies cinétiques individuelles :

$$\widehat{H}_0 = \sum_{q=1}^N \frac{(\mathbf{P}_q)^2}{2m} \quad (4)$$

où m est la masse des particules et \mathbf{P}_q l'opérateur impulsion de la q -ième particule. Le second, \widehat{V}_{ext} , est l'opérateur associé à leur énergie dans un potentiel extérieur appliqué V_1 :

$$\widehat{V}_{\text{ext}} = \sum_{q=1}^N V_1(\mathbf{R}_q) \quad (5)$$

où \mathbf{R}_q est l'opérateur position de la q -ième particule. Pour des électrons de charge électronique q_e subissant le potentiel coulombien attractif d'un noyau de charge $-Zq_e$ placé à l'origine (Z est le numéro atomique du noyau), ce potentiel est le potentiel attractif :

$$V_1(\mathbf{r}) = -\frac{Zq_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}|} \quad (6)$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide. Enfin, \widehat{W}_{int} correspond à leur énergie d'interaction mutuelle :

$$\widehat{W}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{q \neq q'} W_2(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) \quad (7)$$

Pour des électrons, la fonction W_2 est donnée par l'interaction répulsive de Coulomb :

$$W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (8)$$

Les expressions données ci-dessus ne sont que des exemples ; comme mentionné plus haut, la méthode de Hartree-Fock ne se limite pas au calcul des niveaux d'énergie électronique dans un atome.

1-b. Valeur moyenne de l'énergie

Puisque l'état (1) est normé, l'énergie moyenne dans cet état est donnée par :

$$\tilde{E} = \langle \tilde{\Psi} | \hat{H} | \tilde{\Psi} \rangle \quad (9)$$

Nous évaluons successivement la contribution des trois termes de (3), afin d'obtenir une expression sur laquelle nous pourrons ensuite effectuer des variations.

$\alpha.$ *Energie cinétique*

Introduisons une base orthonormée complète $\{|\theta_s\rangle\}$ de l'espace des états à une particule en complétant la suite des états $|\theta_i\rangle$ ($i = 1, 2, \dots, N$) par d'autres états orthonormés ; l'indice s court donc de 1 à D , dimension de cet espace (D peut être infini). Ceci permet de développer \hat{H}_0 selon la relation (B-12) du Chapitre XV :

$$\hat{H}_0 = \sum_{r,s} \langle \theta_r | \frac{\mathbf{P}^2}{2m} | \theta_s \rangle a_{\theta_r}^\dagger a_{\theta_s} \quad (10)$$

où les deux sommes sur r et s courent entre 1 et D . Donc la valeur moyenne dans $|\tilde{\Psi}\rangle$ de l'énergie cinétique s'écrit :

$$\langle \hat{H}_0 \rangle = \sum_{r,s} \langle \theta_r | \frac{\mathbf{P}^2}{2m} | \theta_s \rangle \langle 0 | a_{\theta_N} \dots a_{\theta_2} a_{\theta_1} \left(a_{\theta_r}^\dagger a_{\theta_s} \right) a_{\theta_1}^\dagger a_{\theta_2}^\dagger \dots a_{\theta_N}^\dagger | 0 \rangle \quad (11)$$

qui contient le produit scalaire du ket :

$$\left(a_{\theta_s} \right) a_{\theta_1}^\dagger a_{\theta_2}^\dagger \dots a_{\theta_N}^\dagger | 0 \rangle = \left(a_{\theta_s} \right) |\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N\rangle \quad (12)$$

par le bra :

$$\langle 0 | a_{\theta_N} \dots a_{\theta_2} a_{\theta_1} \left(a_{\theta_r}^\dagger \right) = \langle \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N | \left(a_{\theta_r}^\dagger \right) \quad (13)$$

Mais, dans le ket, l'action de l'opérateur de destruction a_{θ_s} donne zéro s'il n'agit pas sur un ket où l'état individuel est déjà peuplé ; le résultat n'est donc non nul que si l'état $|\theta_s\rangle$ figure dans la série des N états $|\theta_1\rangle, |\theta_2\rangle, \dots, |\theta_N\rangle$. Par conjugaison hermitique de (13), on voit qu'il faut également qu'il en soit de même pour l'état $|\theta_r\rangle$, qui doit figurer dans la même liste. De plus, si $r \neq s$ les résultats obtenus sont des kets avec des nombres d'occupation différents, et sont alors orthogonaux ; ce n'est que si $r = s$ qu'on peut obtenir un produit scalaire différent de zéro, cas auquel le résultat est simplement 1. Pour le voir, il faut amener en tête l'état $|\theta_r\rangle$

à la fois dans le bra et dans le ket ; ceci demande, soit deux transpositions dont les changements de signe se compensent, soit aucune si l'état $|\theta_r\rangle$ était déjà en tête ; une fois l'action des opérateurs effectuée, le bra et le ket correspondent alors exactement aux mêmes états occupés, et leur produit scalaire est 1. On obtient pour finir :

$$\langle \widehat{H}_0 \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \theta_i | \frac{\mathbf{P}^2}{2m} | \theta_i \rangle \quad (14)$$

La valeur moyenne de l'énergie cinétique est donc simplement la somme des valeurs moyennes de l'énergie cinétique dans chacun des états $|\theta_i\rangle$ occupés.

Pour des particules sans spin, l'effet de l'opérateur d'énergie cinétique se traduit en termes de fonctions d'onde individuelles par l'opérateur différentiel $-\hbar^2 \Delta / 2m$. On a donc également :

$$\langle \widehat{H}_0 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \sum_{i=1}^N \theta_i^*(\mathbf{r}) \Delta \theta_i(\mathbf{r}) \quad (15)$$

β. Energie potentielle

Pour la valeur moyenne de l'énergie potentielle \widehat{V}_1 , le calcul est semblable à celui de l'énergie cinétique, puisqu'il s'agit encore d'un opérateur à une particule. On trouve ainsi :

$$\langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \theta_i | V_1(\mathbf{R}) | \theta_i \rangle \quad (16)$$

soit, pour des particules sans spin :

$$\langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle = \int d^3r V_1(\mathbf{r}) \sum_{i=1}^N |\theta_i(\mathbf{r})|^2 \quad (17)$$

On obtient à nouveau simplement la somme des valeurs moyennes associées aux états individuels occupés.

γ. Energie d'interaction

Le calcul de la valeur moyenne dans $|\widetilde{\Psi}\rangle$ de l'énergie d'interaction \widehat{W}_2 a déjà été effectué au § C-5 du Chapitre XV. Dans les égalités (C-28) ainsi que (C-32) à (C-34) de ce chapitre, il suffit de remplacer les n_i par 1 pour tous les états $|\theta_i\rangle$ occupés, par zéro pour les autres, et de changer les fonctions d'onde $u_i(\mathbf{r})$ en $\theta_i(\mathbf{r})$, de sorte que :

$$\begin{aligned} \langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle &= \langle \widetilde{\Psi} | \widehat{W}_{\text{int}} | \widetilde{\Psi} \rangle = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &\quad \times \sum_{i,j=1}^N \left[|\theta_i(\mathbf{r})|^2 |\theta_j(\mathbf{r}')|^2 - \theta_i^*(\mathbf{r}) \theta_j^*(\mathbf{r}') \theta_i(\mathbf{r}') \theta_j(\mathbf{r}) \right] \end{aligned} \quad (18)$$

Nous avons supprimé la contrainte $i \neq j$, qui est inutile puisque les termes $i = j$ s'annulent. La seconde ligne de cette équation contient la somme du terme direct et du terme d'échange.

Nous pouvons écrire ce résultat de façon plus concise en introduisant le projecteur P_N sur le sous-espace \mathcal{E}_N engendré par les N kets $|\theta_i\rangle$:

$$P_N = \sum_{i=1}^N |\theta_i\rangle \langle \theta_i| \quad (19)$$

dont les éléments de matrice sont :

$$\langle \mathbf{r} | P_N | \mathbf{r}' \rangle = \sum_{i=1}^N \theta_i(\mathbf{r}) \theta_i^*(\mathbf{r}') \quad (20)$$

Il vient alors :

$$\begin{aligned} \langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle = \\ \frac{1}{2} \int d^3 r \int d^3 r' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left[\langle \mathbf{r} | P_N | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r}' | P_N | \mathbf{r}' \rangle - \langle \mathbf{r} | P_N | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | P_N | \mathbf{r} \rangle \right] \end{aligned} \quad (21)$$

Remarque :

Les éléments de matrice de P_N sont égaux à la fonction de corrélation spatiale non diagonale $G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, qui sera définie au Chapitre XVI (§ B-3-a). Cette fonction de corrélation s'exprime en fonction de l'opérateur champ $\Psi(\mathbf{r})$ comme la valeur moyenne :

$$G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') \rangle \quad (22)$$

En effet, pour un système de N fermions dans les états $|\theta_1\rangle, |\theta_2\rangle, \dots, |\theta_N\rangle$, on a :

$$\begin{aligned} G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \langle \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N | \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') | \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N \rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N | [\theta_i^*(\mathbf{r}) a_i^\dagger] [\theta_j(\mathbf{r}') a_j] | \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N \rangle = \sum_{i=1}^N \theta_i^*(\mathbf{r}) \theta_i(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (23)$$

On peut alors porter cette relation dans (18) et obtenir :

$$\langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle = \frac{1}{2} \int d^3 r \int d^3 r' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}) G_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}') - G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') G_1(\mathbf{r}', \mathbf{r})] \quad (24)$$

La comparaison avec la relation (C-28) du Chapitre XV, qui donne la même valeur moyenne, indique que le crochet du second membre contient la fonction de corrélation à deux particules $G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Pour un état de Fock, cette dernière se ramène donc à deux produits de fonctions de corrélation (22) à une particule et à deux points :

$$G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}) G_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}') - G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') G_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \quad (25)$$

1-c. Optimisation de la fonction d'onde variationnelle

Nous devons maintenant faire varier $|\widetilde{\Psi}\rangle$ afin de chercher les conditions qui rendent stationnaire l'énergie totale \widetilde{E} :

$$\widetilde{E} = \langle \widehat{H}_0 \rangle + \langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle + \langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle \quad (26)$$

où les trois termes de cette somme sont donnés par (15), (16) et (18). Pour cela, nous allons effectuer une variation de l'un des kets $|\theta_k\rangle$, avec k quelconque choisi entre 1 et N :

$$|\theta_k\rangle \Rightarrow |\theta_k\rangle + |\delta\theta_k\rangle \quad (27)$$

soit, en termes de fonction d'onde individuelle :

$$\theta_k(\mathbf{r}) \Rightarrow \theta_k(\mathbf{r}) + \delta\theta_k(\mathbf{r}) \quad (28)$$

Il en découle les variations suivantes :

$$\delta \langle \widehat{H}_0 \rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} \int d^3r [\delta\theta_k^*(\mathbf{r}) \Delta\theta_k(\mathbf{r}) + \theta_k^*(\mathbf{r}) \Delta\delta\theta_k(\mathbf{r})] \quad (29)$$

ainsi que :

$$\delta \langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle = \int d^3r V_1(\mathbf{r}) [\delta\theta_k^*(\mathbf{r}) \theta_k(\mathbf{r}) + \theta_k^*(\mathbf{r}) \delta\theta_k(\mathbf{r})] \quad (30)$$

Pour la variation de $\langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle$, il faut prendre en compte dans (18) deux contributions : celle des termes $i = k$, et celle des termes $j = k$. Mais elles sont en fait égales puisqu'elles ne diffèrent que par la notation d'un indice muet. Le facteur 1/2 disparaît donc, et l'on obtient :

$$\begin{aligned} \delta \langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle = \int d^3r \int d^3r' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{j=1}^N & \left[[\delta\theta_k^*(\mathbf{r})\theta_k(\mathbf{r}) + \theta_k^*(\mathbf{r})\delta\theta_k(\mathbf{r})] |\theta_j(\mathbf{r}')|^2 \right. \\ & \left. - \delta\theta_k^*(\mathbf{r})\theta_j^*(\mathbf{r}')\theta_k(\mathbf{r}')\theta_j(\mathbf{r}) - \theta_k^*(\mathbf{r})\theta_j^*(\mathbf{r}')\delta\theta_k(\mathbf{r}')\theta_j(\mathbf{r}) \right] \end{aligned} \quad (31)$$

La variation de \widetilde{E} est simplement la somme de (29), (30) et (31).

Considérons maintenant les variations $\delta\theta_k$ qui s'écrivent :

$$\delta\theta_k(\mathbf{r}) = \delta\varepsilon e^{i\chi}\theta_l(\mathbf{r}) \quad \text{avec } l > N \quad (32)$$

(où $\delta\varepsilon$ est un infiniment petit du premier ordre). Ces variations sont proportionnelles à l'une des fonctions d'onde des états non occupés complétant la base orthonormée des états occupés ; la phase χ est un paramètre arbitraire. Au premier ordre, une telle variation ne change, ni la norme de $|\theta_k\rangle$, ni son produit scalaire avec tous les états occupés $l \leq N$; elle est donc compatible avec le fait que la base des états occupés reste orthonormée, comme nous l'avons supposé. La variation de l'énergie au premier ordre $\delta\widetilde{E}$ est obtenue en insérant $\delta\theta_k$ ainsi que son complexe conjugué $\delta\theta_k^*$ dans (29), (30) et (31) ; on obtient alors des termes en $e^{i\chi}$ dans le premier cas, en $e^{-i\chi}$ dans le second. Mais, si \widetilde{E} est stationnaire, sa variation doit être nulle au premier ordre quel que soit χ ; or, lorsque χ est quelconque, la somme d'un terme en $e^{i\chi}$ et d'un autre $e^{-i\chi}$ ne peut rester toujours nulle que si chacun des termes reste lui aussi nul. Il en découle que, pour écrire des conditions de stationnarité, on peut annuler $\delta\widetilde{E}$ en considérant les variations en $\delta\theta_k$ et $\delta\theta_k^*$ comme indépendantes. En ne

retenant que les termes en $\delta\theta_k^*$, on obtient la condition de stationnarité de l'énergie variationnelle :

$$\int d^3r \delta\theta_k^*(\mathbf{r}) \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta\theta_k(\mathbf{r}) + V_1(\mathbf{r})\theta_k(\mathbf{r}) + \int d^3r' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{j=1}^N \left[\theta_k(\mathbf{r}) |\theta_j(\mathbf{r}')|^2 - \theta_j^*(\mathbf{r}')\theta_k(\mathbf{r}')\theta_j(\mathbf{r}') \right] \right\} = 0 \quad (33)$$

soit, compte tenu de (20) :

$$\int d^3r \delta\theta_k^*(\mathbf{r}) \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta\theta_k(\mathbf{r}) + V_1(\mathbf{r})\theta_k(\mathbf{r}) + \int d^3r' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\langle \mathbf{r}' | P_N | \mathbf{r}' \rangle \theta_k(\mathbf{r}) - \langle \mathbf{r} | P_N | \mathbf{r}' \rangle \theta_k(\mathbf{r}')] \right\} = 0 \quad (34)$$

Cette relation peut encore s'écrire :

$$\int d^3r \delta\theta_k^*(\mathbf{r}) \mathcal{D} [\theta_k(\mathbf{r})] = 0 \quad (35)$$

où l'opérateur intégro-différentiel \mathcal{D} est défini par son action sur une fonction quelconque $\theta(\mathbf{r})$:

$$\mathcal{D} [\theta(\mathbf{r})] = \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}) + \int d^3r' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | P_N | \mathbf{r}' \rangle \right\} \theta(\mathbf{r}) - \int d^3r' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \langle \mathbf{r} | P_N | \mathbf{r}' \rangle \theta(\mathbf{r}') \quad (36)$$

Cet opérateur dépend de la fonction de corrélation spatiale diagonale $\langle \mathbf{r}' | P_N | \mathbf{r}' \rangle$ et non diagonale $\langle \mathbf{r} | P_N | \mathbf{r}' \rangle$ associée à l'ensemble des états occupés par les N fermions.

Ainsi, la relation (35) indique que l'effet sur la fonction $\theta_k(\mathbf{r})$ de l'opérateur différentiel \mathcal{D} conduit à une fonction qui est orthogonale à toutes les fonctions $\theta_l(\mathbf{r})$ pour $l > N$. Il en découle que la fonction $\mathcal{D} [\theta_k(\mathbf{r})]$ n'a de composante que sur les fonctions d'onde des états occupés, dont elle est nécessairement une combinaison linéaire. Ainsi, la stationnarité de l'énergie \tilde{E} impose une condition simple : l'invariance sous l'effet de l'opérateur intégro-différentiel \mathcal{D} de l'espace vectoriel \mathcal{F}_N de dimension N engendré par toutes les combinaisons linéaires des fonctions $\theta_i(\mathbf{r})$ avec $i = 1, 2, \dots, N$.

Remarque :

On peut se demander pourquoi nous nous sommes limités aux variations $\delta\theta_k$ écrites en (32), proportionnelles aux états individuels non occupés. La raison en apparaîtra plus clairement au § 2, où l'utilisation d'une méthode plus générale permet de voir directement quelles sont les variations de chacun des états individuels qu'il est réellement utile de considérer (voir en particulier la discussion à la fin du § 2-a). Nous pouvons cependant remarquer dès ici que le choix d'une variation $\delta\theta_k$ proportionnelle à la même fonction d'onde $\theta_k(\mathbf{r})$ aurait pour seul effet de changer la norme

ou la phase de cette fonction d'onde; ceci n'a aucun impact sur l'état quantique associé (de plus, un changement de norme serait incompatible avec nos hypothèses, puisque dans le calcul des valeurs moyennes nous avons supposé que tous les états individuels restent normés). Si l'état ne change pas, l'énergie \tilde{E} ne peut que rester constante, de sorte qu'écrire une condition de stationnarité devient sans objet. De même, donner à $\theta_k(\mathbf{r})$ une variation proportionnelle à une autre fonction d'onde occupée $\theta_l(\mathbf{r})$ (où l est compris entre 1 et N) est tout aussi inutile. En effet, dans cette opération l'opérateur de création a_k^\dagger acquiert une composante sur a_l^\dagger (Chapitre XV, § A-6), mais cela ne modifie pas le vecteur d'état (1) : ce dernier acquiert ainsi une composante où apparaît le carré d'un d'opérateur de création, qui est nul pour des fermions. La stationnarité de l'énergie est donc automatiquement assurée dans ce cas.

1-d. Formulation équivalente de la stationnarité de l'énergie moyenne

L'opérateur \mathcal{D} est diagonalisable dans le sous-espace \mathcal{F}_N , comme on peut le montrer³ à partir de sa définition (36) – une démonstration plus directe sera donnée au § 2. Appelons donc $\varphi_n(\mathbf{r})$ ses fonctions propres. Ces fonctions $\varphi_n(\mathbf{r})$ sont des combinaisons linéaires des $\theta_j(\mathbf{r})$ correspondant aux états apparaissant dans le ket d'essai (1), et engendrent donc le même état à N particules du fait de l'antisymétrisation⁴. Le changement de base des $\theta_i(\mathbf{r})$ vers les $\varphi_n(\mathbf{r})$ n'a aucun effet sur le projecteur P_N sur le sous-espace \mathcal{F}_N , dont les éléments de matrice dans (36) s'expriment de façon analogue à (20) :

$$\langle \mathbf{r} | P_N | \mathbf{r}' \rangle = \sum_{n=1}^N \varphi_n(\mathbf{r}) \varphi_n^*(\mathbf{r}') \quad (37)$$

Les fonctions propres de l'opérateur \mathcal{D} obéissent donc aux équations :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}) + \int d^3 r' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{p=1}^N |\varphi_p(\mathbf{r}')|^2 \right] \varphi_n(\mathbf{r}) - \left[\int d^3 r' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{p=1}^N \varphi_p^*(\mathbf{r}') \varphi_p(\mathbf{r}) \varphi_n(\mathbf{r}') \right] = \tilde{e}_n \varphi_n(\mathbf{r}) \quad (38)$$

3. Tout opérateur hermitique étant diagonalisable, il suffit de montrer que (36) conduit à des éléments de matrice obéissant à la relation de conjugaison hermitique. Il faut donc vérifier que les deux intégrales $\int d^3 r \theta_1^*(\mathbf{r}) \mathcal{D} [\theta_2(\mathbf{r})]$ et $\int d^3 r \theta_2^*(\mathbf{r}) \mathcal{D} [\theta_1(\mathbf{r})]$ sont complexes conjuguées. Pour les contributions à ces éléments de matrice des termes d'énergie cinétique et potentielle en V_1 , on retombe simplement sur la relation habituelle qui assure l'hermiticité des opérateurs correspondants. Pour le terme d'interaction, la conjugaison complexe est immédiatement vérifiée dans le terme direct; dans le terme d'échange, une simple interversion des variables d'intégration $d^3 r$ et $d^3 r'$ et le fait que $W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ soit égal à $W_2(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ permettent de vérifier la conjugaison.

4. Un déterminant ne change pas de valeur si l'on ajoute à une de ses colonnes une combinaison linéaire des autres. Ainsi, on peut ajouter à la première colonne du déterminant de Slater (2) la combinaison linéaire des $\theta_2(\mathbf{r}), \theta_3(\mathbf{r}), \dots$ qui la rend proportionnelle à $\varphi_1(\mathbf{r})$. Puis on peut ajouter à la seconde colonne celle qui la rend proportionnelle à $\varphi_2(\mathbf{r})$, etc. De proche en proche, on aboutit pour finir à une nouvelle expression de la fonction d'onde de départ $\tilde{\Psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ qui contient le déterminant de Slater des $\varphi_i(\mathbf{r})$. Elle est donc proportionnelle à ce déterminant; une démonstration de l'égalité stricte (à un facteur de phase près) sera donnée au § 2.

où les $\tilde{\epsilon}_n$ sont les valeurs propres associées. Ces relations sont appelées “équations de Hartree-Fock”.

Pour que l'énergie moyenne totale associée à un état tel que (1) soit stationnaire, il est donc nécessaire que cet état puisse être engendré à partir de N états individuels dont les fonctions d'onde $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N$ orthogonales satisfont aux équations de Hartree-Fock (38) avec $n = 1, 2, \dots, N$. Inversement, cette condition est suffisante puisque, si l'on remplace les $\theta_k(\mathbf{r})$ par des solutions $\varphi_n(\mathbf{r})$ des équations de Hartree-Fock dans la variation (34) de l'énergie, on obtient un résultat :

$$\tilde{\epsilon}_n \int d^3r \delta\varphi_k^*(\mathbf{r}) \varphi_n(\mathbf{r}) \quad (39)$$

nul pour toutes les variations $\delta\varphi_k(\mathbf{r})$ qui, selon (32), doivent être orthogonales aux N solutions $\varphi_n(\mathbf{r})$. Les conditions (38) sont bien équivalentes à la stationnarité de l'énergie.

1-e. Energie variationnelle

Supposons que l'on ait trouvé une série de solutions aux équations de Hartree-Fock, c'est-à-dire un ensemble de N fonctions propres $\varphi_n(\mathbf{r})$ avec les valeurs propres $\tilde{\epsilon}_i$ associées. Il faut ensuite calculer l'énergie variationnelle minimale \tilde{E}_{HF} du système à N particules. Cette énergie est donnée par la somme (26) des trois termes d'énergies cinétique, potentielle, et d'interaction, obtenus en remplaçant dans (15), (16) et (18) les $\theta_i(\mathbf{r})$ par les fonctions propres $\varphi_n(\mathbf{r})$:

$$\tilde{E}_{HF} = \langle \hat{H}_0 \rangle_{HF} + \langle \hat{V}_{\text{ext}} \rangle_{HF} + \langle \hat{W}_{\text{int}} \rangle_{HF} \quad (40)$$

(les indices HF indiquent qu'il s'agit des énergies moyennes après optimisation de Hartree-Fock pour minimiser l'énergie variationnelle). Intuitivement, on pourrait s'attendre à ce que cette énergie totale soit simplement la somme des énergies $\tilde{\epsilon}_n$, mais nous allons voir que ce n'est pas le cas. En effet, si nous multiplions à gauche l'équation (38) par $\varphi_n^*(\mathbf{r})$ et intégrons sur d^3r , nous obtenons :

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_n = \int d^3r \varphi_n^*(\mathbf{r}) \left\{ \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}) \right] \varphi_n(\mathbf{r}) \right. \\ \left. + \int d^3r' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{p=1}^N \left[|\varphi_p(\mathbf{r}')|^2 \varphi_n(\mathbf{r}) - \varphi_p^*(\mathbf{r}') \varphi_n(\mathbf{r}') \varphi_p(\mathbf{r}) \right] \right\} \quad (41) \end{aligned}$$

Nous sommes alors sur l'indice n , et utilisons (15), (16) et (18) avec les θ remplacés par des φ :

$$\sum_{n=1}^N \tilde{\epsilon}_n = \langle \hat{H}_0 \rangle_{HF} + \langle \hat{V}_{\text{ext}} \rangle_{HF} + 2 \langle \hat{W}_{\text{int}} \rangle_{HF} \quad (42)$$

On constate que cette expression fournit, non pas la valeur stationnaire de l'énergie totale, mais une somme où l'énergie d'interaction entre les particules est comptée deux fois. Physiquement on comprend bien que, si l'on calcule l'énergie de chaque particule en tenant compte de son interaction avec toutes les autres, et si l'on ajoute

ensuite les énergies ainsi obtenues pour chaque particule, on obtient une somme qui inclut deux fois l'énergie d'interaction associée à chaque paire de particules.

Il existe cependant une information utile dans la somme des $\tilde{\epsilon}_n$, information qui permet d'éviter le calcul de la contribution de l'énergie d'interaction à l'énergie variationnelle. On peut en effet éliminer $\langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle$ entre (40) et (42), ce qui donne l'égalité :

$$\tilde{E}_{HF} = \frac{1}{2} \left[\sum_{n=1}^N \tilde{\epsilon}_n + \langle \widehat{H}_0 \rangle_{HF} + \langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle_{HF} \right] \quad (43)$$

où l'énergie d'interaction a disparu. On peut ensuite calculer $\langle \widehat{H}_0 \rangle_{HF}$ et $\langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle_{HF}$ à partir des solutions des équations de Hartree-Fock (38), sans avoir à se préoccuper de l'énergie d'interaction. Si l'on insère (15) et (17) dans cette relation, on obtient l'énergie totale \tilde{E} sous la forme :

$$\tilde{E}_{HF} = \frac{1}{2} \left[\sum_{n=1}^N \tilde{\epsilon}_n + \sum_{n=1}^N \int d^3r' |\varphi_n(\mathbf{r}')|^2 V_1(\mathbf{r}') - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{n=1}^N \int d^3r' \varphi_n^*(\mathbf{r}') \Delta \varphi_n(\mathbf{r}') \right] \quad (44)$$

L'énergie totale est donc la demi-somme des $\tilde{\epsilon}_i$, de l'énergie cinétique moyenne, et enfin de l'énergie potentielle à un corps moyenne.

1-f. Equations de Hartree-Fock

L'équation (38) peut s'écrire :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}) + V^{\text{dir}}(\mathbf{r}) \right] \varphi_n(\mathbf{r}) - \int d^3r' V^{\text{ex}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_n(\mathbf{r}') = \tilde{\epsilon}_n \varphi_n(\mathbf{r}) \quad (45)$$

où les potentiels direct $V^{\text{dir}}(\mathbf{r})$ et d'échange $V^{\text{ex}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ sont définis⁵ par :

$$\begin{aligned} V^{\text{dir}}(\mathbf{r}) &= \sum_{p=1}^N \int d^3r' |\varphi_p(\mathbf{r}')|^2 W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ V^{\text{ex}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_{p=1}^N \varphi_p^*(\mathbf{r}') \varphi_p(\mathbf{r}) W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (46)$$

On remarque que les termes $p = n$ des deux potentiels s'annulent mutuellement ; on peut donc, dans les deux sommations, supprimer ces termes $p = n$ sans changer le résultat final.

On appelle parfois "terme de Hartree" la contribution du potentiel direct, et "terme de Fock" celle du potentiel d'échange. Le premier s'interprète de façon simple ; s'il est écrit sans le terme $p = n$, il correspond à l'interaction d'une particule

5. Le raccourci ex pour le mot échange, souvent utilisé, vient de l'anglais "exchange".

au point \mathbf{r} avec toutes les autres particules aux points \mathbf{r}' , moyennée pour chacune par sa distribution de densité $|\varphi_p(\mathbf{r}')|^2$. Malgré son nom, le potentiel d'échange n'est pas vraiment un potentiel au sens strict ; il n'est pas diagonal en représentation positions, même si fondamentalement il résulte bien d'une interaction entre les particules qui est diagonale en positions. C'est en fait la combinaison entre l'antisymétrisation des fermions et l'approximation variationnelle qui a conduit à cette forme non diagonale particulière. Dimensionnellement, le potentiel d'échange est homogène à un potentiel divisé par le cube d'une longueur. C'est cependant un opérateur hermitique, comme on peut s'en assurer aisément en utilisant le fait que le potentiel de départ $W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est réel et symétrique en \mathbf{r} et \mathbf{r}' .

On considère parfois une version simplifiée plus intuitive des équations, due à Hartree, où les potentiels d'échange sont ignorés dans (45) : sans le terme intégral, ces équations deviennent alors tout à fait semblables à une série d'équations de Schrödinger de particules indépendantes, chacune d'entre elles se déplaçant dans le potentiel moyen créé par toutes les autres (dans le point de vue où le terme $p = n$ est exclu de la somme). Mais, en principe, tenir compte également du terme de Fock doit améliorer la précision du calcul.

Lorsque l'on remplace les potentiels par leurs expressions (46), les équations de Hartree-Fock (45) constituent un ensemble de N équations couplées ; elles sont non linéaires puisque les potentiels direct et d'échange dépendent eux-mêmes des fonctions $\varphi_p(\mathbf{r})$. Bien qu'elles ressemblent à des équations aux valeurs propres linéaires permettant de déterminer des fonctions propres $\varphi_n(\mathbf{r})$, du fait que ces fonctions apparaissent par ailleurs dans les potentiels (46), une résolution linéaire demanderait en quelque sorte de connaître par avance les solutions que l'on cherche. On utilise généralement le terme "autocohérent" pour qualifier ce genre de situation⁶ ainsi que les solutions $\varphi_n(\mathbf{r})$ auxquelles elle conduit.

On ne dispose pas de méthode analytique générale permettant de résoudre des équations non linéaires autocohérentes de ce type, même dans leur version simplifiée de Hartree ; c'est pourquoi on a souvent recours à des méthodes numériques par approximations successives. Dans une première étape, on part d'une série de fonctions $\varphi_n^{(0)}(\mathbf{r})$ qui semblent plausibles, et on calcule par (46) les potentiels associés ; les considérant alors comme donnés, on obtient des équations linéaires aux valeurs propres que l'on peut résoudre (c'est tout à fait envisageable numériquement puisque, au lieu d'une seule équation très compliquée dans un espace à $3N$ dimensions, on est en présence de N équations indépendantes à 3 dimensions) ; la diagonalisation d'un opérateur hermitique conduit alors à une nouvelle série de fonctions orthonormées, résultat de la première itération, qu'on appelle $\varphi_n^{(1)}(\mathbf{r})$ et $\tilde{e}_n^{(1)}$. La seconde itération part alors de ces $\varphi_n^{(1)}(\mathbf{r})$, qu'elle utilise à leur tour pour calculer de nouvelles valeurs des potentiels et obtenir de nouvelles équations différentielles linéaires ; leur résolution conduit alors à l'ordre suivant $\varphi_n^{(2)}(\mathbf{r})$, $\tilde{e}_n^{(2)}$, etc. Au bout de quelques itérations, on peut espérer que les $\varphi_n^{(n)}(\mathbf{r})$ et $\tilde{e}_n^{(n)}$ ne varient plus beaucoup en fonction de l'ordre d'itération (n), et l'on considère alors qu'on a trouvé une bonne approximation des solutions des équations de Hartree-Fock. Il ne reste plus qu'à appliquer (44) pour obtenir l'énergie recherchée. Il arrive aussi que des arguments physiques permettent de disposer directement de bonnes fonctions d'onde d'essai $\varphi_n(\mathbf{r})$ dès le départ, sans aucune itération ; on les insère alors simplement dans (44) pour obtenir l'énergie.

6. Le mot anglais correspondant, souvent trouvé dans la littérature, est "self-consistent".

Remarques :

(i) Rien ne garantit l'unicité des solutions des équations de Hartree-Fock : par le processus d'itération décrit ci-dessus, selon le choix des fonctions $\varphi_n^{(0)}(\mathbf{r})$ on peut parfaitement aboutir à des solutions différentes. Cette multiplicité des solutions est en fait un intérêt de la méthode qui peut mener, non seulement au niveau fondamental, mais aux niveaux excités.

(ii) Comme nous le verrons au § 2, la prise en compte du spin 1/2 des électrons d'un atome ne complique pas beaucoup les équations de Hartree-Fock. On suppose généralement que le potentiel à un corps est diagonal dans une base de deux états de spin notés + et -, et que le potentiel d'interaction n'agit pas sur les spins. Il suffit alors de juxtaposer N_+ équations, contenant N_+ fonctions d'onde $\varphi_n^+(\mathbf{r})$ associées aux particules de spin +, avec N_- autres équations contenant N_- fonctions d'onde $\varphi_n^-(\mathbf{r})$ associées aux particules de spin -. Ces deux familles d'équations ne sont cependant pas indépendantes, car elles contiennent le même potentiel direct. Ce dernier est en effet obtenu en incluant dans la sommation sur p de la première ligne de (46) toutes les $N = N_+ + N_-$ fonctions d'onde. Pour le potentiel d'échange, ce couplage entre les deux familles n'existe pas : dans la seconde ligne de (46), la somme sur p n'inclut que les fonctions d'onde de même état de spin. La raison physique de cette limitation est que, si des particules sont dans des états de spin opposés, elles peuvent en principe être reconnues à la direction de leur spin (les interactions n'agissent pas sur les spins), et ne se comportent donc pas comme des particules indiscernables ; ce n'est que si les spins sont les mêmes que les effets d'échange se manifestent.

2. Généralisation : méthode opératorielle

Nous reprenons maintenant l'exposé de la méthode de façon plus générale, par une méthode opératorielle qui permet des expressions plus concises, tout en tenant compte de façon plus explicite de l'existence possible du spin - on sait que le spin des électrons joue un rôle essentiel dans la structure des atomes. Ceci nous permettra de mieux identifier l'objet mathématique qui est réellement varié dans l'optimisation de l'énergie, et qui est en fait un projecteur ; physiquement, ce projecteur n'est autre que l'opérateur densité à une particule tel qu'il a été défini au § B-4 du Chapitre XV. Nous arriverons ainsi à des expressions à la fois plus compactes et plus générales des équations de Hartree-Fock. Elles contiennent un opérateur de Hartree-Fock agissant sur une seule particule, un peu comme si cette dernière était unique, mais contenant un opérateur potentiel défini par une trace partielle qui traduit l'effet des interactions avec les autres particules dans l'approximation du champ moyen. L'intérêt de cet opérateur est donc de donner accès à une valeur approchée de l'énergie du système total à partir d'énergies individuelles, ces dernières étant obtenues grâce à un calcul du même type que pour une particule unique placée dans un champ moyen. Cette approche permet de mieux comprendre la façon dont le champ moyen rend compte de manière approchée de l'interaction avec toutes les autres particules, et de surcroît peut fournir le point de départ à des approximations plus précises.

Nous supposons donc comme plus haut que le ket variationnel à N particules $|\widetilde{\Psi}\rangle$ est donné par :

$$|\widetilde{\Psi}\rangle = a_{\theta_1}^\dagger a_{\theta_2}^\dagger \dots a_{\theta_N}^\dagger |0\rangle \quad (47)$$

Ce ket est engendré par N kets individuels orthonormés $|\theta_k\rangle$, mais maintenant ces kets peuvent décrire des particules de spin quelconque. Considérons la base orthonormée $\{|\theta_k\rangle\}$ de l'espace des états à une particule, qui complète la série des états $|\theta_i\rangle$ ($i = 1, 2, \dots, N$) par d'autres états orthonormés. Le projecteur P_N sur le sous-espace \mathcal{E}_N engendré est obtenu par somme des projections sur les N premiers $|\theta_i\rangle$:

$$P_N = \sum_{i=1}^N |\theta_i\rangle \langle \theta_i| \quad (48)$$

Or cet opérateur n'est autre que l'opérateur densité à une particule défini au § B-4 du Chapitre XV (normé par une trace égale au nombre N de particules, et non à l'unité). En effet, la relation (B-24) de ce chapitre s'écrit dans la base des $|\theta_k\rangle$:

$$\langle \theta_l | \hat{\rho}_1 | \theta_k \rangle = \langle a_k^\dagger a_l \rangle \quad (49)$$

où la valeur moyenne $\langle a_k^\dagger a_l \rangle$ est prise dans l'état quantique (47). Mais, pour un tel état de Fock, la valeur moyenne n'est non nulle que si l'opérateur de création reconstruit la population détruite par l'opérateur d'annihilation, donc si $k = l$; dans ce cas, la valeur moyenne est égale à la population n_k de l'état individuel $|\theta_k\rangle$. Or, dans l'état variationnel (47), toutes les populations sont nulles sauf celles des N premiers états $|\theta_i\rangle$ ($i = 1, 2, \dots, N$), qui sont égales à l'unité. Donc l'opérateur densité à une particule est représenté par une matrice qui est diagonale dans la base des $|\theta_i\rangle$, et dont les N premiers éléments sur la diagonale sont égaux à un; tous les autres sont nuls. C'est donc bien la matrice associée au projecteur P_N , et nous pouvons écrire :

$$\hat{\rho}_1 = P_N \quad (50)$$

Nous allons voir que les valeurs moyennes qui sont nécessaires au calcul s'expriment toutes simplement en fonction de cet opérateur.

2-a. Énergie moyenne

Evaluons maintenant les divers termes contenus dans l'énergie moyenne, en commençant par les termes contenant des opérateurs à une seule particule.

α. Énergie cinétique et potentielle extérieure

Pour calculer la valeur moyenne $\langle \hat{H}_0 \rangle$ de l'énergie cinétique, nous pouvons utiliser la relation (B-12) du Chapitre XV pour obtenir :

$$\langle \hat{H}_0 \rangle = \sum_{i,j} \langle \theta_i | \frac{\mathbf{P}^2}{2m} | \theta_j \rangle \langle a_i^\dagger a_j \rangle \quad (51)$$

Le même raisonnement que pour l'évaluation des éléments de matrice (49) montre que la valeur moyenne $\langle a_i^\dagger a_j \rangle$ dans l'état (47) n'est non nulle que si $i = j$; si c'est le cas, elle est égale à l'unité lorsque $i \leq N$, nulle sinon. Il vient donc :

$$\langle \hat{H}_0 \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \theta_i | \frac{\mathbf{P}^2}{2m} | \theta_i \rangle = \text{Tr}_1 \left\{ P_N \frac{\mathbf{P}^2}{2m} \right\} \quad (52)$$

Un indice 1 a été ajouté à la trace pour rendre explicite que cette trace est prise dans l'espace des états d'une seule particule, non dans l'espace de Fock. Les deux opérateurs contenus dans la trace agissent uniquement sur cette même particule arbitrairement numérotée 1 ; on pourrait évidemment tout aussi bien remplacer l'indice 1 par celui q de n'importe quelle particule, puisque toutes jouent le même rôle. Le calcul de l'énergie potentielle provenant du potentiel extérieur se fait exactement de la même façon, et conduit à :

$$\langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \theta_i | V_1 | \theta_i \rangle = \text{Tr}_1 \{ P_N V_1 \} \quad (53)$$

β. Énergie moyenne d'interaction, opérateur potentiel de Hartree-Fock

Le calcul de la valeur moyenne de l'énergie d'interaction \widehat{W}_{int} peut être mené à partir de l'expression générale (C-16) du Chapitre XV de tout opérateur à deux particules, qui donne :

$$\langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j | W_2(1,2) | 1 : \theta_k ; 2 : \theta_l \rangle \langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \rangle \quad (54)$$

Pour que la valeur moyenne $\langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \rangle$ dans l'état de Fock $|\widetilde{\Psi}\rangle$ soit non nulle, il faut que l'opérateur ne change pas les populations des états individuels $|\theta_i\rangle$ et $|\theta_j\rangle$. Comme au § C-5-b du Chapitre XV, deux possibilités se présentent : soit $i = k$ et $j = l$ (terme direct), soit $i = l$ et $j = k$ (terme d'échange). Par commutation des opérateurs on obtient alors :

$$\begin{aligned} \langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \rangle &= \delta_{ik} \delta_{jl} \langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i \rangle + \delta_{il} \delta_{jk} \langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j \rangle \\ &= [\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk}] n_i n_j \end{aligned} \quad (55)$$

où n_i et n_j sont les populations respectives des états $|\theta_i\rangle$ et $|\theta_j\rangle$. Or ces populations ne sont non nulles que si les indices i et j sont compris entre 1 et N , cas auquel elles sont égales à l'unité (on remarque également qu'il faut que $i \neq j$ pour ne pas obtenir zéro). Pour finir, il vient⁷ :

$$\begin{aligned} \langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \left[\langle 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j | W_2(1,2) | 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j | W_2(1,2) | 1 : \theta_j ; 2 : \theta_i \rangle \right] \end{aligned} \quad (56)$$

(la contrainte $i \neq j$ peut être ignorée puisque le membre de droite est automatiquement nul dans ce cas). Ici aussi, les indices 1 et 2 désignent deux particules quelconques (mais différentes), qu'on aurait tout aussi bien pu noter q et q' . Il en découle que :

$$\langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \langle 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j | W_2(1,2) [1 - P_{\text{ex}}(1,2)] | 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j \rangle \quad (57)$$

7. Comme au complément précédent, nous simplifions $W_2(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$ en $W_2(1,2)$.

où $P_{\text{ex}}(1, 2)$ est l'opérateur d'échange entre les particules 1 et 2 (la transposition qui les échange par permutation). Nous pouvons alors mettre ce résultat sous une forme semblable à (53) en introduisant le "potentiel de Hartree-Fock" W_{HF} , analogue à un potentiel extérieur agissant dans l'espace de la particule 1 ; ce potentiel est défini comme l'opérateur d'éléments de matrice :

$$\langle \theta_i | W_{HF}(1) | \theta_k \rangle = \sum_{j=1}^N \langle 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j | W_2(1, 2) [1 - P_{\text{ex}}(1, 2)] | 1 : \theta_k ; 2 : \theta_j \rangle \quad (58)$$

Cet opérateur est hermitique car, comme les deux opérateurs P_{ex} et W_2 sont hermitiques et commutent, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \langle \theta_k | W_{HF}(1) | \theta_i \rangle &= \sum_{j=1}^N \langle 1 : \theta_k ; 2 : \theta_j | W_2(1, 2) [1 - P_{\text{ex}}(1, 2)] | 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j \rangle \\ &= \sum_{j=1}^N \langle 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j | [1 - P_{\text{ex}}(1, 2)] W_2(1, 2) | 1 : \theta_k ; 2 : \theta_j \rangle^* \\ &= \langle \theta_i | W_{HF}(1) | \theta_k \rangle^* \end{aligned} \quad (59)$$

De plus, l'expression (58) n'est autre que l'élément de matrice d'une trace partielle sur la particule 2 (Complément E_{III}, § 5.b) :

$$\boxed{W_{HF}(1) = \text{Tr}_2 \left\{ P_N(2) W_2(1, 2) [1 - P_{\text{ex}}(1, 2)] \right\}} \quad (60)$$

où le rôle du projecteur P_N à l'intérieur de la trace partielle est de limiter la somme sur j à ses N premiers termes, comme en (57). L'opérateur à une particule $W_{HF}(1)$ est donc la trace partielle sur une seconde particule (notée arbitrairement 2) d'un produit d'opérateurs agissant sur deux particules. La sommation sur j étant ainsi prise en compte, il reste dans (57) la somme sur i , qui introduit une trace sur la particule restante 1, et l'on obtient :

$$\langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr}_1 \{ P_N(1) W_{HF}(1) \} \quad (61)$$

Cette valeur moyenne dépend du sous-espace choisi avec le ket variationnel $|\widehat{\Psi}\rangle$ de deux façons : comme plus haut, explicitement via le projecteur $P_N(1)$ qui apparaît dans la valeur moyenne (61), mais aussi implicitement via la définition du potentiel de Hartree-Fock dans (60).

γ . Rôle de l'opérateur densité réduit à une particule

Toutes les valeurs moyennes s'expriment donc en fonction du projecteur P_N sur le sous-espace \mathcal{E}_N de l'espace des états individuels engendré par les N états individuels $|\theta_1\rangle, |\theta_2\rangle, \dots, |\theta_N\rangle$, c'est-à-dire selon (50) de l'opérateur densité réduit à une particule $\widehat{\rho}_1 = P_N$. C'est donc plutôt cet opérateur densité qui constitue la véritable variable à optimiser, plutôt que l'ensemble des états individuels, dont certaines variations ne font pas varier P_N et sont donc sans importance.

De plus, la donnée du ket d'essai $|\widetilde{\Psi}\rangle$ est équivalente à celle de P_N . En effet le ket variationnel $|\widetilde{\Psi}\rangle$ construit en (1) ne dépend pas de la base choisie dans le sous-espace \mathcal{E}_N ; plus précisément, si l'on part d'une base orthonormée quelconque $\{|u_j\rangle\}$ dans ce sous-espace autre que celle des $|\theta_i\rangle$, et si l'on substitue dans (1) les $a_{u_j}^\dagger$ aux $a_{\theta_i}^\dagger$, le ket reste le même à un facteur de phase près sans importance. En effet (Chap. XV, § A.6), chacun des opérateurs $a_{u_j}^\dagger$ est alors une combinaison linéaire des $a_{\theta_i}^\dagger$, de sorte que dans le produit de tous les $a_{u_j}^\dagger$ ($i = 1, 2, \dots, N$) apparaissent des produits de N opérateurs $a_{\theta_i}^\dagger$. Mais la relation (A-43) du Chapitre XV indique que les carrés de tous les opérateurs de création sont nuls, ce qui entraîne que les seuls produits non nuls sont ceux contenant une fois et une seule chacun des N opérateurs $a_{\theta_i}^\dagger$ différents. Chaque terme qui subsiste est donc proportionnel au ket $|\widetilde{\Psi}\rangle$ construit à partir des $a_{\theta_i}^\dagger$, et les kets variationnels construits à partir des deux bases sont nécessairement proportionnels. Comme de plus la définition (1) des kets variationnels assure leur normalisation, les deux kets à N particules ne peuvent différer que par un facteur de phase, ce qui les rend équivalents du point de vue physique. C'est donc bien $P_N = \widehat{\rho}_1$ qui résume au mieux le ket d'essai $|\widetilde{\Psi}\rangle$.

2-b. Optimisation de l'opérateur densité à une particule

Nous devons maintenant faire varier $P_N = \widehat{\rho}_1$ afin de chercher les conditions qui rendent stationnaire l'énergie totale :

$$\widetilde{E} = \langle H_0 \rangle + \langle V_1 \rangle + \langle \widehat{W}_2 \rangle = \text{Tr}_1 \left\{ P_N \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1 + W_{HF} \right] \right\} \quad (62)$$

Nous considérons donc la variation :

$$P_N \Rightarrow P_N + \delta P_N \quad (63)$$

qui entraîne les variations suivantes pour les valeurs moyennes des opérateurs à une particule :

$$\delta \langle H_0 \rangle + \delta \langle V_1 \rangle = \text{Tr}_1 \left\{ \delta P_N \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1 \right] \right\} \quad (64)$$

Pour l'énergie d'interaction, on a deux termes :

$$\delta \langle \widehat{W}_2 \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr}_1 \{ \delta P_N W_{HF} \} + \frac{1}{2} \text{Tr}_1 \{ P_N \delta W_{HF} \} \quad (65)$$

Mais ces deux termes sont égaux puisque :

$$\text{Tr}_1 \{ P_N(1) \delta W_{HF}(1) \} = \text{Tr}_{1,2} \left\{ P_N(1) \delta P_N(2) \widehat{W}_2(1,2) [1 - P_{\text{ex}}(1,2)] \right\} \quad (66)$$

où l'on reconnaît dans le second membre l'expression de la trace :

$$\text{Tr}_2 \{ \delta P_N(2) W_{HF}(2) \} \quad (67)$$

Comme on peut changer la numérotation de la particule 2 en 1 sans changer la valeur de la trace, on retrouve bien l'expression du premier terme. Pour finir, la variation d'énergie est donc :

$$\delta \widetilde{E} = \text{Tr}_1 \left\{ \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1 + W_{HF} \right] \delta P_N \right\} \quad (68)$$

Pour faire varier P_N , choisissons une valeur j_0 de j et effectuons la substitution :

$$|\theta_{j_0}\rangle \Rightarrow |\theta_{j_0}\rangle + e^{i\chi} |\delta\theta\rangle \quad (69)$$

où $|\delta\theta\rangle$ est un ket quelconque dans l'espace des états individuels et χ un nombre réel quelconque ; aucun autre vecteur d'état individuel que $|\theta_{j_0}\rangle$ ne varie. La variation de P_N est alors :

$$\delta P_N = e^{i\chi} |\delta\theta\rangle \langle\theta_{j_0}| + e^{-i\chi} |\theta_{j_0}\rangle \langle\delta\theta| \quad (70)$$

Nous ne donnons à $|\delta\theta\rangle$ de composante sur aucun des $|\theta_i\rangle$, donc pas de composante dans \mathcal{E}_N , puisque cela ne changerait, ni \mathcal{E}_N , ni le projecteur correspondant P_N . Nous imposons donc :

$$P_N |\delta\theta\rangle = 0 \quad (71)$$

qui assure en particulier que la norme de $|\theta_{j_0}\rangle$ reste bien constante⁸ au premier ordre en $|\delta\theta\rangle$. Si l'on reporte (70) dans (68), on obtient :

$$\begin{aligned} \delta \tilde{E} = e^{i\chi} \text{Tr}_1 \left\{ \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1 + W_{HF} \right] |\delta\theta\rangle \langle\theta_{j_0}| \right\} \\ + e^{-i\chi} \text{Tr}_1 \left\{ \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1 + W_{HF} \right] |\theta_{j_0}\rangle \langle\delta\theta| \right\} \end{aligned} \quad (72)$$

Si l'énergie est stationnaire, cette expression doit être une variation nulle quel que soit le choix arbitraire de χ . Or la combinaison linéaire de deux exponentielles $e^{i\chi}$ et $e^{-i\chi}$ ne peut rester nulle pour tout χ que si les deux coefficients des exponentielles sont eux-mêmes nuls. On peut donc évaluer à zéro séparément chacun des deux termes, et obtenir :

$$0 = \text{Tr}_1 \left\{ \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1 + W_{HF} \right] |\theta_{j_0}\rangle \langle\delta\theta| \right\} = \langle\delta\theta| \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1 + W_{HF} \right] |\theta_{j_0}\rangle \quad (73)$$

Cette relation doit être satisfaite pour tout $|\delta\theta\rangle$ orthogonal au sous-espace \mathcal{E}_N . Pour finir, si nous définissons l'opérateur de Hartree-Fock à une particule H_{HF} par :

$$\boxed{H_{HF} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1 + W_{HF}} \quad (74)$$

la condition pour que l'énergie totale soit stationnaire est donc tout simplement que le ket $H_{HF} |\theta_{j_0}\rangle$ appartienne à \mathcal{E}_N :

$$H_{HF} |\theta_{j_0}\rangle \in \mathcal{E}_N \quad (75)$$

Comme cette relation doit être satisfaite quel que soit le $|\theta_{j_0}\rangle$ choisi parmi les $|\theta_1\rangle$, $|\theta_2\rangle$, ..., $|\theta_N\rangle$, il s'ensuit que le sous-espace \mathcal{E}_N est stable sous l'action de l'opérateur (74).

8. Comme (71) indique que $|\delta\theta\rangle$ est orthogonal à toute combinaison linéaire des $|\theta_i\rangle$, on a alors $(\langle\theta_{j_0}| + \langle\delta\theta|)(|\theta_{j_0}\rangle + |\delta\theta\rangle) = \langle\theta_{j_0}| \theta_{j_0}\rangle + \langle\delta\theta| \delta\theta\rangle = 1 +$ termes du second ordre.

2-c. Opérateur de champ moyen

On peut alors considérer la restriction de l'opérateur H_{HF} à l'intérieur de ce sous-espace :

$$\bar{H}_{HF} = P_N(1) \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1(1) + W_{HF}(1) \right] P_N(1) \quad (76)$$

Considéré comme un opérateur agissant dans le sous-espace \mathcal{E}_N engendré par les N kets $|\theta_j\rangle$, c'est un opérateur linéaire et hermitique, donc diagonalisable; appelons alors $|\varphi_n\rangle$ ses vecteurs propres ($n = 1, 2, \dots, N$), qui sont des combinaisons linéaires des kets $|\theta_j\rangle$. La condition (75) de stationnarité de l'énergie revient à dire que les $|\varphi_n\rangle$ sont, non seulement vecteurs propres de \bar{H}_{HF} , mais également de l'opérateur H_{HF} défini en (74) dans tout l'espace des états à une particule (sans restriction à \mathcal{E}_N); ils satisfont donc :

$$\boxed{H_{HF} |\varphi_n\rangle = \tilde{\epsilon}_n |\varphi_n\rangle} \quad (77)$$

L'opérateur H_{HF} est défini en (74), où l'opérateur W_{HF} est donné par (60) et dépend donc du projecteur P_N . Or ce dernier s'exprime de la même façon en fonction des $|\varphi_n\rangle$ que des $|\theta_i\rangle$, de sorte que (48) peut être remplacé par :

$$P_N = \sum_{n=1}^N |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (78)$$

Les relations (77), combinées avec la définition (60) où l'on a inséré (78), constituent un système d'équations permettant de déterminer les $|\varphi_n\rangle$ de façon auto-cohérente; ce sont les équations de Hartree-Fock. La forme opératorielle (77) est plus simple que celle obtenue au § 1-c; elle met en valeur la similarité avec une équation aux valeurs propres habituelle pour une particule unique se déplaçant dans un potentiel extérieur, ce qui illustre bien la notion de champ moyen auto-cohérent. Il faut toutefois bien garder à l'esprit que, via le projecteur (78) qui intervient dans W_{HF} , le potentiel dans lequel se déplace cette particule dépend de l'ensemble des états occupés par toutes les particules. De plus, il s'agit d'une théorie approchée (méthode variationnelle), et non d'un calcul exact.

La discussion du § 1-f s'applique à nouveau : la dépendance de W_{HF} en fonction des $|\varphi_n\rangle$ confère un caractère non linéaire aux équations de Hartree-Fock, ce qui impose généralement une résolution par approximations successives. On part d'un ensemble de N états individuels $|\varphi_n^0\rangle$ pour construire une première valeur de P_N et de l'opérateur W_{HF} , que l'on reporte dans l'hamiltonien (74) pour obtenir la valeur de cet opérateur. On considère alors cette dernière comme fixée, de sorte que les équations de Hartree-Fock (77) deviennent linéaires; elles peuvent être résolues comme des équations aux valeurs propres habituelles. Ceci conduit à de nouvelles valeurs $|\varphi_n^1\rangle$ des $|\varphi_n\rangle$, et conclut la première itération. Pour une seconde itération, on injecte les $|\varphi_n^1\rangle$ dans (78), on calcule une nouvelle valeur de l'opérateur de champ moyen W_{HF} ; considérant à nouveau ce dernier comme fixe, on résout l'équation aux valeurs propres linéaire ainsi obtenue. Ceci conduit à une seconde itération $|\varphi_n^2\rangle$ des $|\varphi_n\rangle$, et ainsi de suite. Si les valeurs initiales $|\varphi_n^0\rangle$ sont physiquement plausibles, on peut espérer une convergence rapide vers la solution recherchée des équations non linéaires de Hartree-Fock.

Le calcul de l'énergie variationnelle se fait par la même méthode qu'au § 1-e. Si nous multiplions à gauche l'équation (77) par le bra $\langle \varphi_n |$, nous obtenons :

$$\tilde{\epsilon}_n = \langle \varphi_n | \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1 + W_{HF} \right] | \varphi_n \rangle \quad (79)$$

soit, par somme sur l'indice n :

$$\sum_{n=1}^N \tilde{\epsilon}_n = \sum_{n=1}^N \langle \varphi_n | \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1 + W_{HF} \right] | \varphi_n \rangle = \text{Tr}_1 \left\{ P_N(1) \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1 + W_{HF} \right] \right\} \quad (80)$$

Donc, compte tenu de (51), (53) et (61), il vient :

$$\sum_{n=1}^N \tilde{\epsilon}_n = \langle H_0 \rangle_{HF} + \langle V_1 \rangle_{HF} + 2 \langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle_{HF} \quad (81)$$

où l'énergie d'interaction entre les particules est comptée deux fois. Pour obtenir l'énergie \tilde{E} , on peut éliminer $\langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle$ entre (26) et cette relation, ce qui donne :

$$\tilde{E} = \frac{1}{2} \left[\sum_{n=1}^N \tilde{\epsilon}_n + \langle H_0 \rangle_{HF} + \langle V_1 \rangle_{HF} \right] \quad (82)$$

2-d. Equations de Hartree-Fock pour des électrons

Supposons maintenant que les fermions étudiés soient des particules de spin 1/2, des électrons par exemple. La base $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ des états individuels utilisée au § 1 doit alors être remplacée par celle des kets $\{|\mathbf{r}, \nu\rangle\}$, où ν est l'indice de spin qui prend 2 valeurs distinctes notées $\pm 1/2$, ou plus simplement \pm . A toutes les sommations sur d^3r il faut maintenant adjoindre une sommation sur les 2 valeurs de l'indice ν de spin ; ainsi, un vecteur $|\varphi\rangle$ dans l'espace des états individuels s'écrit maintenant :

$$|\varphi\rangle = \sum_{\nu=\pm 1/2} \int d^3r \varphi(\mathbf{r}, \nu) |\mathbf{r}, \nu\rangle \quad (83)$$

avec :

$$\varphi(\mathbf{r}, \nu) = \langle \mathbf{r}, \nu | \varphi \rangle \quad (84)$$

Les variables \mathbf{r} et ν jouent un rôle similaire. Cependant la première est continue et la seconde discrète, alors que leur écriture dans une même parenthèse risquerait de masquer cette différence. C'est pourquoi nous préférons souvent mettre l'indice discret en indice haut de la fonction φ , et écrire :

$$\varphi^\nu(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \nu | \varphi \rangle \quad (85)$$

Construisons maintenant un état variationnel $|\widetilde{\Psi}\rangle$ à N particules à partir de N états orthonormés $|\varphi_n^{\nu_n}\rangle$, avec $n = 1, 2, \dots, N$. Chacun des $|\varphi_n^{\nu_n}\rangle$ décrit un état individuel incluant les variables de spin et de position ; les N_+ premières valeurs de

ν_n ($n = 1, 2, \dots, N_+$) valent $+1/2$, les N_- dernières $-1/2$, avec $N_+ + N_- = N$ (nous considérons N_+ et N_- comme fixés, quitte à les faire varier ensuite pour élargir la famille variationnelle). Dans l'espace des états individuels, nous introduisons une base complète $\{|\varphi_k^{\nu_k}\rangle\}$ dont les N premiers kets sont les $|\varphi_n^{\nu_n}\rangle$, mais où l'indice k varie de 1 à l'infini⁹.

Nous supposons que les éléments de matrice de potentiel externe V_1 sont diagonaux en ν ; les deux éléments de matrice diagonaux peuvent cependant prendre des valeurs différentes $V_1^\pm(\mathbf{r})$, ce qui permet de tenir compte de la présence éventuelle d'un champ magnétique se couplant aux spins. L'interaction entre deux particules $W_2(1, 2)$ est indépendante des spins et diagonale en représentation de position des deux particules, comme c'est le cas par exemple de l'interaction de Coulomb entre électrons. L'hamiltonien ne peut donc coupler des états où les nombres de particules N_+ et N_- sont différents.

Examinons maintenant ce que deviennent alors les équations générales de Hartree-Fock en représentation $\{|\mathbf{r}, \nu\rangle\}$. Dans cette représentation, l'effet des opérateurs d'énergie cinétique et potentielle est bien connu; il ne reste à calculer que celle du potentiel de Hartree-Fock W_{HF} . Pour obtenir ses éléments de matrice, écrivons (60) en utilisant la base $\{|1 : \mathbf{r}, \nu; 2 : \varphi_k^{\nu_k}\rangle\}$ pour calculer la trace :

$$\langle \mathbf{r}, \nu | W_{HF}(1) | \mathbf{r}', \nu' \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \langle 1 : \mathbf{r}, \nu; 2 : \varphi_k^{\nu_k} | \left[\sum_{p=1}^N |2 : \varphi_p^{\nu_p}\rangle \langle 2 : \varphi_p^{\nu_p}| \right] W_2(1, 2) [1 - P_{\text{ex}}(1, 2)] | 1 : \mathbf{r}', \nu'; 2 : \varphi_k^{\nu_k} \rangle \quad (86)$$

Dans le second membre apparaît le produit scalaire $\langle 2 : \varphi_k^{\nu_k} | 2 : \varphi_p^{\nu_p} \rangle$ qui est égal à δ_{kp} . La somme sur k disparaît donc, et l'on obtient :

$$\langle \mathbf{r}, \nu | W_{HF}(1) | \mathbf{r}', \nu' \rangle = \sum_{p=1}^N \langle 1 : \mathbf{r}, \nu; 2 : \varphi_p^{\nu_p} | W_2(1, 2) [1 - P_{\text{ex}}(1, 2)] | 1 : \mathbf{r}', \nu'; 2 : \varphi_p^{\nu_p} \rangle \quad (87)$$

(i) Prenons d'abord la contribution du terme direct, obtenu en ignorant le terme en $P_{\text{ex}}(1, 2)$ dans le crochet. Pour cela nous remplaçons le ket $|2 : \varphi_p^{\nu_p}\rangle$ selon :

$$|2 : \varphi_p^{\nu_p}\rangle = \int d^3 r_2 \varphi_p^{\nu_p}(\mathbf{r}_2) |2 : \mathbf{r}_2, \nu_p\rangle \quad (88)$$

Le fait que l'opérateur soit diagonal en représentation position permet alors d'écrire :

$$\begin{aligned} W_2(1, 2) |1 : \mathbf{r}', \nu'; 2 : \varphi_p^{\nu_p}\rangle &= W_2(1, 2) \int d^3 r_2 \varphi_p^{\nu_p}(\mathbf{r}_2) |1 : \mathbf{r}', \nu'; 2 : \mathbf{r}_2, \nu_p\rangle \\ &= \int d^3 r_2 \varphi_p^{\nu_p}(\mathbf{r}_2) W_2(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2) |1 : \mathbf{r}', \nu'; 2 : \mathbf{r}_2, \nu_p\rangle \end{aligned} \quad (89)$$

Le terme direct de (87) devient alors :

9. L'indice k détermine donc à la fois l'état orbital et l'état de spin de la particule; l'indice ν n'est pas indépendant, puisqu'il est fixé pour chaque valeur de k .

$$\int d^3 r_2 \sum_{p=1}^N W_2(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2) \varphi_p^{\nu p}(\mathbf{r}_2) \langle 1 : \mathbf{r}, \nu; 2 : \varphi_p^{\nu p} | 1 : \mathbf{r}', \nu'; 2 : \mathbf{r}_2, \nu_p \rangle \quad (90)$$

où le produit scalaire du bra et du ket est égal à $\delta_{\nu\nu'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\varphi_p^{\nu p}(\mathbf{r}_2)]^*$. Nous obtenons donc le résultat :

$$\delta_{\nu\nu'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \int d^3 r_2 W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2) \sum_{p=1}^N |\varphi_p^{\nu p}(\mathbf{r}_2)|^2 = \delta_{\nu\nu'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) \quad (91)$$

avec :

$$V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) = \sum_{p=1}^N \int d^3 r' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\varphi_p^{\nu p}(\mathbf{r}')|^2 \quad (92)$$

(ii) Prenons maintenant le terme d'échange, celui qui contient l'opérateur $P_{\text{ex}}(1, 2)$ dans le crochet de (87). Pour l'obtenir, nous pouvons par exemple dans (87) commuter les deux opérateurs $W_2(1, 2)$ et $P_{\text{ex}}(1, 2)$; l'effet du second est alors une permutation des deux particules dans le bra. Si nous effectuons cette opération dans (90) nous obtenons, compte tenu du signe moins du terme d'échange :

$$- \int d^3 r_2 \sum_{p=1}^N W_2(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2) \varphi_p^{\nu p}(\mathbf{r}_2) \langle 1 : \varphi_p^{\nu p}; 2 : \mathbf{r}, \nu | 1 : \mathbf{r}', \nu'; 2 : \mathbf{r}_2, \nu_p \rangle \quad (93)$$

Il apparaît dans le produit scalaire le produit $\delta_{\nu\nu_p} \delta_{\nu_p\nu'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)$, de sorte que l'intégrale sur $d^3 r_2$ disparaît. Ce terme est nul si $\nu \neq \nu'$, d'où un facteur en $\delta_{\nu\nu'}$. Comme $W_2(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, il reste alors :

$$-\delta_{\nu\nu'} \sum_{\nu_p=\nu} W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\varphi_p^{\nu p}(\mathbf{r})] [\varphi_p^{\nu p}(\mathbf{r}')]^* = -\delta_{\nu\nu'} V_{\text{ex}}^{\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (94)$$

où la somme est une somme sur les valeurs de p telles que $\nu_p = \nu = \nu'$ (donc, suivant les cas, restreinte aux N_+ premières valeurs de p , ou aux N_- dernières); nous avons défini le potentiel d'échange V_{ex}^{ν} par :

$$V_{\text{ex}}^{\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\nu_p=\nu} W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\varphi_p^{\nu p}(\mathbf{r}')]^* [\varphi_p^{\nu p}(\mathbf{r})] \quad (95)$$

Pas plus que le terme direct, le terme d'échange n'agit donc sur le spin. Il en diffère cependant pour deux raisons : d'une part la sommation sur p est restreinte aux états de même spin ν ; d'autre part il introduit une contribution non diagonale en position (mais sans intégrale), qui ne peut donc être assimilée à un potentiel ordinaire (on parle parfois de "potentiel non local" pour souligner cette propriété).

Compte tenu de ces résultats, le produit scalaire de l'équation (77) par $\langle \mathbf{r}, \nu |$ fait apparaître trois potentiels, un potentiel direct $V_{\text{dir}}(\mathbf{r})$ et deux potentiels d'échange $V_{\text{ex}}^{\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ avec $\nu = \pm 1/2$. L'équation (77) s'écrit ainsi en représentation $\{|\mathbf{r}, \nu\rangle\}$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_1^{\nu n}(\mathbf{r}) + V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) \right] \varphi_n^{\nu n}(\mathbf{r}) - \int d^3 r' V_{\text{ex}}^{\nu n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_n^{\nu n}(\mathbf{r}') = \tilde{\epsilon}_n \varphi_n^{\nu n}(\mathbf{r})$$

Nous obtenons ainsi les équations de Hartree-Fock avec spin en représentation position, d'usage très général en physique et en chimie quantiques. Il est indifférent, dans ces équations, de prendre en compte ou non le terme où l'indice p de sommation dans (92) et (95) est égal à n (celui de la fonction d'onde recherchée) ; on constate en effet que les contributions $n = p$ se compensent exactement dans le potentiel direct et celui d'échange.

Les deux termes, le "terme de Hartree" qui donne la contribution du potentiel direct, et le "terme de Fock" celle du potentiel d'échange, ont la même interprétation que plus haut (§ 1-f). Le terme de Hartree contient la contribution de tous les autres électrons au potentiel moyen ressenti par un électron. En revanche, le potentiel d'échange ne fait intervenir que les autres électrons qui sont dans le même état de spin, ce qui s'interprète simplement : pour que l'échange intervienne, deux particules doivent être totalement indiscernables. Or, si elles sont dans des états orthogonaux de spin, comme les interactions n'agissent pas sur les spins, on peut en principe constamment savoir laquelle est laquelle, ce qui les rend discernables ; les effets de l'échange quantique s'annulent alors. Comme nous l'avons déjà souligné, le potentiel d'échange n'est pas vraiment un potentiel au sens strict ; il n'est pas diagonal en représentation positions, même si fondamentalement il résulte bien d'une interaction entre les particules qui est diagonale en positions ; c'est l'antisymétrisation des fermions qui, avec l'approximation variationnelle choisie, a conduit à cette forme non diagonale particulière. C'est cependant un opérateur hermitique, comme on peut s'en assurer aisément en utilisant le fait que le potentiel de départ $W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est réel et symétrique en \mathbf{r} et \mathbf{r}' .

2-e. Discussion

La résolution des équations de Hartree-Fock, qui sont non linéaires, se fait généralement par la méthode d'approximation par itérations successives discutée au § 1-f. Il n'existe aucune raison particulière pour que la solution des équations de Hartree-Fock soit unique¹⁰ ; au contraire, elles peuvent conduire à des solutions qui dépendent des états choisis pour démarrer les itérations non linéaires. De fait, elles peuvent conduire à tout un spectre d'énergies possibles pour le système. Le calcul des niveaux d'énergie fondamentaux ainsi que des niveaux excités des atomes est généralement fait de cette manière. C'est ainsi que l'on peut donner un contenu plus précis et quantitatif aux orbitales atomiques discutées dans le Complément E_{VII} , à l'approximation du champ central et aux "configurations" électroniques du Complément B_{XIV} ; on remarque au passage que l'énergie d'échange, introduite dans ce complément pour un système de deux électrons, n'est qu'un cas particulier de l'énergie du terme d'échange dans le potentiel de Hartree-Fock. Mais il existe bien d'autres systèmes physiques où les mêmes idées s'appliquent : les noyaux (la force de Coulomb est alors remplacée par la force nucléaire d'interaction entre les nucléons), les agrégats atomiques (c'est alors plutôt un potentiel interatomique avec une partie répulsive et une partie attractive, cf. Compléments C_{XI} et G_{XI}), et bien d'autres systèmes.

Une fois qu'on a obtenu une solution de Hartree-Fock pour un problème complexe, on n'est pas contraint de s'arrêter là ; on peut utiliser la base des fonctions

10. Toutes conduisent cependant à une borne supérieure de l'énergie du fondamental.

propres ainsi calculées comme point de départ pour des calculs plus précis incluant les corrélations entre particules, par exemple par la méthode des perturbations (Chapitre XI). Dans les spectres atomiques, il apparaît parfois des cas où deux configurations donnent des énergies de champ moyen qui sont assez proches ; les effets des termes d'interaction au-delà du champ moyen seront dans ce cas plus marqués. Des calculs perturbatifs restreints à l'espace des configurations en question permettent alors d'obtenir de meilleures approximations des niveaux d'énergie et de leurs fonctions d'onde ; on parle alors de "mélanges", ou "interactions entre configurations".

Remarque :

La méthode variationnelle basée sur des états de Fock n'est pas la seule qui permette d'obtenir les équations de Hartree-Fock. On peut également partir d'une approximation de l'opérateur densité à deux particules ρ_{II} en fonction de l'opérateur densité à une particule ρ_I et écrire :

$$\rho_{II}(1, 2) \simeq \frac{1}{2} [1 + P_{\text{ex}}(1, 2)] \rho_I(1) \rho_I(2) \quad (97)$$

On exprime ensuite l'énergie du système à N particules en fonction de ρ_I , afin de la minimiser en variant cet opérateur, et l'on retrouve les mêmes résultats que plus haut. Cette méthode se ramène en fait à une fermeture de la hiérarchie des équations à N corps (§ C-4 du Chapitre XVI). Nous avons d'ailleurs déjà vu avec la formule (21) et au § 2-a que l'approximation de Hartree-Fock revient à exprimer les fonctions de corrélation à deux particules en fonction de celles à une seule particule. En termes de fonctions de corrélation (Complément A_{XVI}), cela revient à remplacer la fonction à deux particules (fonction à quatre points) par un produit de fonctions à une particule (fonction à deux points), avec un terme d'échange. Enfin, une autre façon est de recourir à la théorie des perturbations sous forme de diagrammes ; l'approximation de Hartree-Fock est alors obtenue en ne retenant qu'une certaine classe de diagrammes (la classe des diagrammes connexes).

Mentionnons enfin qu'il existe d'autres méthodes que celle de Hartree-Fock permettant d'obtenir des solutions approchées de l'équation de Schrödinger d'un ensemble de fermions en interaction, en particulier la méthode de la "fonctionnelle de la densité électronique". Son étude dépasse cependant le cadre de cet ouvrage, et nous renvoyons le lecteur à [6] qui donne un résumé de la méthode et propose un certain nombre de références.

Complément F_{XV}

Fermions, approximation de Hartree-Fock dépendant du temps

1	Ket variationnel et notations	119
2	Méthode variationnelle	120
	2-a Définition d'une fonctionnelle	120
	2-b Stationnarité	121
	2-c Cas particulier d'un hamiltonien indépendant du temps	123
3	Calcul de l'optimisateur	123
	3-a Energie moyenne	123
	3-b Potentiel de Hartree-Fock	124
	3-c Dérivée temporelle	125
	3-d Valeur de la fonctionnelle	125
4	Equations du mouvement	125
	4-a Equations de Hartree-Fock dépendantes du temps	126
	4-b Particules dans un seul état de spin	127
	4-c Discussion	127

La méthode du champ moyen de Hartree-Fock a été présentée dans le Complément E_{XV} dans le cadre d'un problème indépendant du temps : la recherche des états stationnaires d'un système de fermions en interaction (celle de l'équilibre thermique sera abordée au Complément G_{XV}). Dans le présent complément, nous montrons comment cette même méthode de champ moyen s'applique également à l'étude de problèmes dépendant du temps. Pour cela, au § 1 nous allons inclure une dépendance temporelle dans le ket de Hartree-Fock variationnel (état de Fock dépendant du temps). Nous introduirons ensuite au § 2 un principe variationnel général s'appliquant à la résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Nous effectuerons ensuite au § 3 un calcul de la fonction à optimiser pour un état de Fock ; nous constaterons ainsi que le même opérateur de champ moyen que celui du Complément E_{XV} peut ici aussi jouer un rôle très utile. Les équations de Hartree-Fock dépendant du temps seront enfin obtenues et discutées au § 4. Pour plus de détails sur les méthodes de Hartree-Fock en général, le lecteur pourra par exemple consulter le Chapitre 7 de la référence [5], et tout particulièrement son Chapitre 9 pour les problèmes dépendant du temps.

1. Ket variationnel et notations

Nous supposons donc que le vecteur d'état à N particules $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle$ s'écrit sous la forme :

$$|\widetilde{\Psi}(t)\rangle = a_{\theta_1(t)}^\dagger a_{\theta_2(t)}^\dagger \dots a_{\theta_N(t)}^\dagger |0\rangle \quad (1)$$

où les $a_{\theta_1(t)}^\dagger, a_{\theta_2(t)}^\dagger, \dots, a_{\theta_N(t)}^\dagger$ sont les opérateurs de création associés à une série arbitraire d'états individuels orthonormés $|\theta_1(t)\rangle, |\theta_2(t)\rangle, \dots, |\theta_N(t)\rangle$ dépendant du

temps t . Pour le moment, cette série d'états est arbitraire, mais le but du calcul variationnel qui va suivre est précisément de déterminer cette dépendance en temps.

Comme dans les compléments précédents, nous supposons que l'hamiltonien \widehat{H} est la somme d'un hamiltonien d'énergie cinétique, d'un hamiltonien d'interaction avec un potentiel extérieur, et d'un terme d'interaction entre les particules :

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}_{\text{ext}}(t) + \widehat{W}_{\text{int}} \quad (2)$$

avec :

$$\widehat{H}_0 = \sum_{q=1}^N \frac{(\mathbf{P}_q)^2}{2m} \quad (3)$$

(m est la masse des particules, \mathbf{P}_q l'opérateur impulsion de la q -ième particule) et :

$$\widehat{V}_{\text{ext}}(t) = \sum_{q=1}^N V_1(\mathbf{R}_q, t) \quad (4)$$

et enfin :

$$\widehat{W}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{q \neq q'} W_2(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) \quad (5)$$

2. Méthode variationnelle

Nous introduisons maintenant un principe variationnel général ; ce principe permet d'obtenir l'équation de Schrödinger dépendant du temps à partir de la stationnarité d'une fonctionnelle S du vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$.

2-a. Définition d'une fonctionnelle

Considérons un hamiltonien arbitraire donné $H(t)$. Considérons un vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$, dépendant du temps d'une façon quelconque ; nous notons $|\overline{\Psi}(t)\rangle$ le ket, physiquement équivalent à $|\Psi(t)\rangle$, qui garde une norme constante :

$$|\overline{\Psi}(t)\rangle = \frac{|\Psi(t)\rangle}{\sqrt{\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle}} \quad (6)$$

Nous définissons la fonctionnelle S de $|\overline{\Psi}(t)\rangle$ par¹ :

$$\begin{aligned} S[|\overline{\Psi}(t)\rangle] &= \int_{t_0}^{t_1} dt \operatorname{Re} \langle \overline{\Psi}(t) | \left[i\hbar \frac{d}{dt} - H(t) \right] |\overline{\Psi}(t)\rangle \\ &= \int_{t_0}^{t_1} dt \left\{ \frac{i\hbar}{2} \left[\left\langle \overline{\Psi}(t) \left| \frac{d}{dt} \overline{\Psi}(t) \right\rangle - \left\langle \frac{d}{dt} \overline{\Psi}(t) \left| \overline{\Psi}(t) \right\rangle \right] - \langle \overline{\Psi}(t) | H(t) | \overline{\Psi}(t) \rangle \right\} \end{aligned} \quad (7)$$

où t_0 et t_1 sont deux temps quelconques satisfaisant $t_0 < t_1$. Dans le cas particulier où $|\overline{\Psi}(t)\rangle$ est choisi égal à une solution $|\overline{\Psi}_S(t)\rangle$ de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\overline{\Psi}_S(t)\rangle = H(t) |\overline{\Psi}_S(t)\rangle \quad (8)$$

1. La notation où l'opérateur de dérivation d/dt est écrit entre un bra et un ket signifie que l'opérateur dérive le ket qui le suit (pas le bra qui le précède).

on voit immédiatement que le crochet de la première ligne de (7) s'annule, de sorte que :

$$S [|\bar{\Psi}_S(t)\rangle] = 0 \quad (9)$$

On peut intégrer par parties le second terme² du crochet de la seconde ligne de (7), ce qui lui donne la même forme que le premier avec, en plus, un terme tout intégré. Le résultat est alors :

$$\begin{aligned} S [|\bar{\Psi}(t)\rangle] &= \left\{ \int_{t_0}^{t_1} dt \langle \bar{\Psi}(t) | \left[i\hbar \frac{d}{dt} - H(t) \right] | \bar{\Psi}(t) \rangle \right\} \\ &\quad + \frac{i\hbar}{2} \left[\langle \bar{\Psi}(t_0) | \bar{\Psi}(t_0) \rangle - \langle \bar{\Psi}(t_1) | \bar{\Psi}(t_1) \rangle \right] \\ &= \int_{t_0}^{t_1} dt \langle \bar{\Psi}(t) | \left[i\hbar \frac{d}{dt} - H(t) \right] | \bar{\Psi}(t) \rangle \end{aligned} \quad (10)$$

où nous avons utilisé dans la seconde ligne le fait que la norme de $|\bar{\Psi}(t)\rangle$ reste constamment égale à l'unité. Cette expression de S est semblable à la forme initiale (7), mais sans la partie réelle.

2-b. Stationnarité

Supposons maintenant que $|\bar{\Psi}(t)\rangle$ ait entre t_0 et t_1 une dépendance temporelle quelconque, tout en conservant une norme constante comme l'exige (6); la fonctionnelle prend alors une certaine valeur S , a priori non nulle. Examinons à quelles conditions S est stationnaire lorsque $|\bar{\Psi}(t)\rangle$ subit une variation infinitésimale $|\delta\bar{\Psi}(t)\rangle$:

$$|\bar{\Psi}(t)\rangle \Rightarrow |\bar{\Psi}(t)\rangle + |\delta\bar{\Psi}(t)\rangle \quad (11)$$

Le fait que la norme de $|\bar{\Psi}(t)\rangle$ doit rester égale à l'unité conduit à introduire³ un multiplicateur de Lagrange $\lambda(t)$, et à rendre stationnaire la fonction :

$$\begin{aligned} \bar{S} [|\bar{\Psi}(t)\rangle] &= S [|\bar{\Psi}(t)\rangle] - \lambda(t) \langle \bar{\Psi}(t) | \bar{\Psi}(t) \rangle \\ &= \int_{t_0}^{t_1} dt \langle \bar{\Psi}(t) | \left[i\hbar \frac{d}{dt} - H(t) - \lambda(t) \right] | \bar{\Psi}(t) \rangle \end{aligned} \quad (12)$$

où $\lambda(t)$ est une fonction réelle du temps t .

La variation $\delta\bar{S}$ de \bar{S} au premier ordre est obtenue par report de (11) dans (10). C'est la somme d'un terme $\delta\bar{S}_1$ contenant le ket $|\delta\bar{\Psi}(t)\rangle$ et d'un autre $\delta\bar{S}_2$

2. Si l'on intègre par parties le premier terme plutôt que le second, on obtient l'équation complexe conjuguée de (10), qui n'apporte donc aucune information nouvelle.

3. Pour que la normalisation de $|\bar{\Psi}(t)\rangle$ soit conservée au premier ordre, il faut (et il suffit) que le produit scalaire $\langle \bar{\Psi}(t) | \delta\bar{\Psi}(t) \rangle$ soit nul ou imaginaire pur. Si c'est le cas, le multiplicateur de Lagrange $\lambda(t)$ est inutile; sa présence permet cependant de supposer que la variation $|\delta\bar{\Psi}(t)\rangle$ est quelconque.

contenant le bra $\langle \delta \bar{\Psi}(t) |$:

$$\begin{aligned} \delta \bar{S}_1 &= \int_{t_0}^{t_1} dt \langle \bar{\Psi}(t) | \left[i\hbar \frac{d}{dt} - H(t) - \lambda(t) \right] | \delta \bar{\Psi}(t) \rangle \\ \delta \bar{S}_2 &= \int_{t_0}^{t_1} dt \langle \delta \bar{\Psi}(t) | \left[i\hbar \frac{d}{dt} - H(t) - \lambda(t) \right] | \bar{\Psi}(t) \rangle \end{aligned} \quad (13)$$

Prenons maintenant une autre variation du ket :

$$| \bar{\Psi}(t) \rangle \Rightarrow | \bar{\Psi}(t) \rangle + i | \delta \bar{\Psi}(t) \rangle \quad (14)$$

qui produit une variation $\delta' \bar{S}$ de \bar{S} ; dans cette seconde variation, le terme en $| \delta \bar{\Psi}(t) \rangle$ devient $\delta' \bar{S}_1 = i \delta \bar{S}_1$, alors que le terme en $\langle \delta \bar{\Psi}(t) |$ devient $\delta' \bar{S}_2 = -i \delta \bar{S}_2$. Or, si la fonctionnelle est stationnaire au voisinage de $| \bar{\Psi}(t) \rangle$, les deux variations $\delta \bar{S}$ et $\delta' \bar{S}$ sont nécessairement nulles, comme le sont également $\delta \bar{S} - i \delta' \bar{S}$ et $\delta \bar{S} + i \delta' \bar{S}$. Mais, dans ces combinaisons n'apparaissent plus que les termes en $\delta \bar{S}_1$ pour la première, ou les termes en $\delta \bar{S}_2$ pour la seconde, de sorte que ces termes sont tous deux nuls : il est ainsi possible d'écrire séparément des conditions de stationnarité par rapport aux variations du bra et du ket.

Nous pouvons par exemple écrire $\delta \bar{S}_2 = 0$, donc la nullité du second membre de la seconde ligne de (13). Comme l'évolution temporelle entre t_0 et t_1 du bra $\langle \delta \bar{\Psi}(t) |$ est arbitraire, cette condition impose que le ket qu'il multiplie soit nul à tout instant. La conclusion est donc que le ket $| \bar{\Psi}(t) \rangle$ doit obéir à l'équation :

$$\left[i\hbar \frac{d}{dt} - H(t) - \lambda(t) \right] | \bar{\Psi}(t) \rangle = 0 \quad (15)$$

qui n'est autre que l'équation de Schrödinger associée à un hamiltonien $H(t) + \lambda(t)$.

En fait, $\lambda(t)$ n'introduit qu'un simple changement de l'origine des énergies ; ceci ne modifie que la phase totale⁴ du vecteur d'état $| \bar{\Psi}(t) \rangle$, et n'a donc aucun effet physique ; on peut donc sans perte de généralité ignorer ce multiplicateur de Lagrange et poser :

$$\lambda(t) = 0 \quad (16)$$

Ainsi, une condition nécessaire⁵ à la stationnarité de S est que $| \bar{\Psi}(t) \rangle$ obéisse à l'équation de Schrödinger (8) – ou soit physiquement équivalent (égal à un facteur de phase globale dépendant du temps près) à une solution de cette équation. Réciproquement, supposons que $| \bar{\Psi}(t) \rangle$ soit solution de l'équation de Schrödinger, et donnons à ce ket une variation comme en (11). Il est alors évident sur la seconde ligne de (13) que $\delta \bar{S}_2$ s'annule. Quant à $\delta \bar{S}_1$, une intégration par parties sur le temps montre qu'il est le complexe conjugué de $\delta \bar{S}_2$, donc également nul. La fonctionnelle S est donc stationnaire au voisinage de toute solution exacte de l'équation de Schrödinger.

4. Si dans (15) on pose $| \bar{\Psi}(t) \rangle = e^{-i\alpha(t)} | \bar{\Theta}(t) \rangle$, on constate que $| \bar{\Theta}(t) \rangle$ obéit à l'équation différentielle obtenue en remplaçant $\lambda(t)$ par $\lambda(t) - \hbar \frac{d\alpha}{dt}$ dans (15). Il suffit donc de choisir pour $\alpha(t)$ l'intégrale sur le temps de la fonction $\lambda(t)$ pour faire disparaître cette constante de l'équation différentielle.

5. Le même raisonnement à partir de la variation $\delta S - i \delta' S$ conduit à la complexe conjuguée de (8), donc en fait à la même relation.

Supposons enfin que l'on choisisse une famille variationnelle \mathcal{F} quelconque de kets $|\Psi_{\mathcal{F}}(t)\rangle$ normés, et qu'il existe dans cette famille un ket $|\Psi_{\mathcal{F}}^{\text{stat}}(t)\rangle$ qui rende S stationnaire. Un cas particulier simple est celui où \mathcal{F} est une famille \mathcal{F}_0 qui contient la solution exacte de l'équation de Schrödinger ; d'après ce que nous avons vu, cette solution exacte rend S stationnaire, et c'est donc nécessairement $|\Psi_{\mathcal{F}_0}^{\text{stat}}(t)\rangle$. Dans ce cas, annuler la variation de S permet donc de repérer, au sein de la famille \mathcal{F}_0 , la solution exacte recherchée. Modifions maintenant la famille \mathcal{F} de façon continue à partir de \mathcal{F}_0 ; en général, \mathcal{F} ne contient plus la solution exacte de l'équation de Schrödinger. Nous pouvons cependant suivre comment sont modifiées les valeurs à tout instant du ket $|\Psi_{\mathcal{F}}^{\text{stat}}(t)\rangle$: partant d'une solution exacte de l'équation, ce ket change progressivement ; par continuité, il ne peut s'éloigner beaucoup de cette solution exacte si \mathcal{F} reste proche de \mathcal{F}_0 . C'est pourquoi annuler la variation de S dans la famille reste une façon d'identifier un membre de la famille \mathcal{F} dont l'évolution reste proche de celle d'une solution de l'équation de Schrödinger. C'est la méthode que nous employons maintenant avec une famille variationnelle particulière, celle des états de Fock.

2-c. Cas particulier d'un hamiltonien indépendant du temps

Si l'hamiltonien H est indépendant du temps, on peut rechercher des kets $|\overline{\Psi}\rangle$ ne dépendant pas de t qui rendent stationnaire la fonctionnelle S . La fonction à intégrer dans l'expression de la fonctionnelle S devient alors, elle aussi, indépendante du temps ; la fonctionnelle prend la valeur :

$$S = (t_1 - t_0) \langle \overline{\Psi} | H | \overline{\Psi} \rangle \quad (17)$$

Comme les deux temps t_0 et t_1 sont fixes, la stationnarité de S revient à celle de l'élément de matrice diagonal de l'hamiltonien $\langle \overline{\Psi} | H | \overline{\Psi} \rangle$. Nous retompons ainsi sur la condition de stationnarité de la méthode des variations indépendante du temps (Complément E_{XI}). Cette dernière apparaît donc comme un cas particulier de la méthode plus générale des variations dépendantes du temps. Il n'est donc pas surprenant que les méthodes de Hartree-Fock dépendantes ou indépendantes du temps conduisent au même potentiel de Hartree-Fock, ainsi que nous allons le voir dans ce qui suit.

3. Calcul de l'optimisateur

La famille de vecteurs d'état que nous considérons est constituée par l'ensemble des kets de Fock $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle$ définis en (1). Il nous faut maintenant calculer la fonction à intégrer dans la fonctionnelle (10) lorsque $|\Psi(t)\rangle$ prend la valeur $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle$.

3-a. Energie moyenne

Pour le terme en $H(t)$, le calcul est en fait identique à celui déjà fait au § 1-b du Complément E_{XV}. On commence par compléter la suite des états orthonormés $|\theta_i(t)\rangle$ avec $i = 1, 2, \dots, N$ par d'autres états orthonormés $|\theta_i(t)\rangle$ avec $i = N + 1, N + 2, \dots$, pour obtenir une base orthonormée complète dans l'espace des états individuels. On utilise dans cette base l'expression (B-12) du chapitre XV pour

exprimer les opérateurs à une particule, la relation (C-16) pour les opérateurs à deux particules, et le fait que les valeurs moyennes de produits d'opérateurs de création et d'annihilation dans un état de Fock s'obtiennent facilement. Elles ne diffèrent en effet de zéro que si le produit d'opérateurs laisse inchangées les populations des états individuels. Les relations (52), (53) et (57) de ce Complément E_{XV} restent donc valables lorsqu'on y introduit une dépendance en temps des $|\theta_i\rangle$. La valeur moyenne de l'énergie cinétique est ainsi :

$$\langle \widehat{H}_0 \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \theta_i(t) | \frac{\mathbf{P}^2}{2m} | \theta_i(t) \rangle \quad (18)$$

celle de l'énergie potentielle externe :

$$\langle \widehat{V}_{\text{ext}}(t) \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \theta_i(t) | V_1(\mathbf{R}, t) | \theta_i(t) \rangle \quad (19)$$

et celle de l'énergie d'interaction :

$$\langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N \langle 1 : \theta_i(t); 2 : \theta_j(t) | W_2(1, 2) [1 - P_{\text{ex}}(1, 2)] | 1 : \theta_i(t); 2 : \theta_j(t) \rangle \quad (20)$$

3-b. Potentiel de Hartree-Fock

Dans (20) apparaît l'élément diagonal $i = k$ de l'opérateur potentiel de Hartree-Fock $W_{HF}(1, t)$, dont les éléments de matrice ont été définis de façon générale par la relation (58) du Complément E_{XV} :

$$\begin{aligned} & \langle \theta_i(t) | W_{HF}(1, t) | \theta_k(t) \rangle \\ &= \sum_j^N \langle 1 : \theta_i(t); 2 : \theta_j(t) | W_2(1, 2) [1 - P_{\text{ex}}(1, 2)] | 1 : \theta_k(t); 2 : \theta_j(t) \rangle \end{aligned} \quad (21)$$

Nous avons également noté dans ce Complément E_{XV} que $W_{HF}(1, t)$ est un opérateur hermitique.

Il est souvent commode d'exprimer le potentiel de Hartree-Fock sous la forme d'une trace partielle :

$$\boxed{W_{HF}(1, t) = \text{Tr}_2 \left\{ P_N(2, t) W_2(1, 2) [1 - P_{\text{ex}}(1, 2)] \right\}} \quad (22)$$

où P_N est le projecteur sur le sous-espace sous-tendu par les N kets $|\theta_i(t)\rangle$:

$$P_N(2, t) = \sum_{i=1}^N |2 : \theta_i(t)\rangle \langle 2 : \theta_i(t)| \quad (23)$$

Ce projecteur est également, comme nous l'avons vu, l'opérateur densité réduit $\widehat{\rho}_1$ à une particule (normé par une trace égale au nombre total N de particules) :

$$P_N(2, t) = \widehat{\rho}_1(2, t) \quad (24)$$

On peut alors écrire la valeur moyenne de l'énergie d'interaction sous la forme :

$$\boxed{\langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr}_1 \left\{ \widehat{\rho}_1(1, t) W_{HF}(1, t) \right\}} \quad (25)$$

3-c. Dérivée temporelle

Quant au terme qui contient une dérivée en temps, la fonction à intégrer qu'il contient s'écrit :

$$\sum_{i=1}^N \langle 0 | a_{\theta_N}(t) \dots a_{\theta_i}(t) \dots a_{\theta_1}(t) a_{\theta_1}^\dagger(t) \dots \left[\frac{d}{dt} a_{\theta_i}^\dagger(t) \right] \dots a_{\theta_N}^\dagger(t) | 0 \rangle \quad (26)$$

Dans chacun des termes de cette somme, tous les états individuels j autres que l'état i (celui qui subit la dérivation) conduisent à une expression du type :

$$\langle 0 | a_{\theta_j}(t) a_{\theta_j}^\dagger(t) | 0 \rangle \quad (27)$$

qui est égale à 1 puisque cette expression donne le carré de la norme de l'état $a_{\theta_j}^\dagger(t) | 0 \rangle$, qui est simplement l'état de Fock $|n_j = 1\rangle$. Pour l'état i , il introduit un facteur qui s'écrit sous forme d'un produit scalaire dans l'espace des états à une particule :

$$\langle 0 | a_{\theta_i}(t) \frac{d}{dt} a_{\theta_i}^\dagger(t) | 0 \rangle = \langle \theta_i(t) | \frac{d}{dt} \theta_i(t) \rangle \quad (28)$$

3-d. Valeur de la fonctionnelle

Si l'on regroupe tous ces résultats, on obtient la valeur de la fonctionnelle S sous la forme :

$$S \left[\widetilde{\Psi}(t) \right] = \sum_{i=1}^N \int_{t_0}^{t_1} dt \left\{ i\hbar \langle \theta_i(t) | \frac{d}{dt} \theta_i(t) \rangle - \langle \theta_i(t) | \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1(t) \right] | \theta_i(t) \rangle \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \langle 1 : \theta_i(t); 2 : \theta_j(t) | W_2(1, 2) [1 - P_{\text{ex}}(1, 2)] | 1 : \theta_i(t); 2 : \theta_j(t) \rangle \right\} \quad (29)$$

4. Equations du mouvement

Nous faisons maintenant varier le ket $|\theta_k(t)\rangle$ selon :

$$|\theta_k(t)\rangle \Rightarrow |\theta_k(t)\rangle + |\delta\theta_k(t)\rangle \quad \text{avec} \quad k \leq N \quad (30)$$

Comme dans le Complément E_{XV}, nous ne prenons en compte que les variations $|\delta\theta_k(t)\rangle$ qui induisent effectivement une variation du ket $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle$; celles où $|\delta\theta_k(t)\rangle$ est proportionnel à l'un des états occupés $|\theta_l(t)\rangle$ avec $l \leq N$ n'entraînent aucune variation de $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle$ (ou tout au plus une variation de phase) et sont donc sans aucune conséquence sur la valeur de S . Donc, de façon analogue aux relations (32) ou en (69) du Complément E_{XV}, nous supposons que :

$$|\delta\theta_k(t)\rangle = \delta f(t) e^{i\chi} |\theta_l(t)\rangle \quad \text{avec} \quad l > N \quad (31)$$

où $\delta f(t)$ est une fonction infinitésimale du temps.

Le calcul est alors presque le même que celui du § 2-b du Complément E_{XV}. Lorsque $|\theta_k(t)\rangle$ varie selon (31), mais sans qu'aucun autre état occupé ne varie, seuls

varient dans la première ligne de (29) les termes $i = k$. Dans la seconde ligne ce sont, soit les termes $i = k$, soit les termes $j = k$; cependant, comme l'opérateur $W_2(1, 2)$ est symétrique par échange des particules, les variations dues aux termes $i = k$ et $j = k$ se doublent, ce qui fait simplement disparaître le facteur $1/2$. Toutes ces variations prennent la forme de termes contenant, soit le ket $e^{i\chi} |\delta\theta_k(t)\rangle$, soit le bra $\langle\delta\theta_k(t)| e^{-i\chi}$. Or leur somme doit s'annuler quelle que soit la valeur arbitraire de χ ; ceci n'est possible que si chacun des deux termes est égal à zéro. L'annulation du terme en $e^{-i\chi}$ conduit alors à l'égalité suivante, où l'on a inséré la variation (31) de $|\theta_k(t)\rangle$:

$$\int_{t_0}^{t_1} dt \delta f(t) \left\{ i\hbar \langle\theta_l(t)| \frac{d}{dt} \theta_k(t)\rangle - \langle\theta_l(t)| \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1(t) \right] |\theta_k(t)\rangle \right. \\ \left. - \sum_{j=1}^N \langle 1 : \theta_l(t); 2 : \theta_j(t) | W_2(1, 2) [1 - P_{\text{ex}}(1, 2)] | 1 : \theta_k(t); 2 : \theta_j(t) \rangle \right\} = 0 \quad (32)$$

Dans la fonction à intégrer, on reconnaît l'opérateur potentiel de Hartree-Fock $W_{HF}(1, t)$ défini en (21); on a donc :

$$\int_{t_0}^{t_1} dt \delta f(t) \left\{ \langle\theta_l(t)| \left[i\hbar \frac{d}{dt} - \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - V_1(t) - W_{HF}(t) \right] |\theta_k(t)\rangle \right\} = 0 \quad (33)$$

avec $l > N$.

4-a. Equations de Hartree-Fock dépendantes du temps

Le choix de la fonction $\delta f(t)$ est arbitraire. Pour que l'expression (33) s'annule quel que soit $\delta f(t)$, il faut que la fonction du temps entre accolades soit nulle à tout instant t . La stationnarité implique donc que le ket :

$$\left[i\hbar \frac{d}{dt} - \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - V_1(t) - W_{HF}(t) \right] |\theta_k(t)\rangle \quad (34)$$

n'ait de composante sur aucun des états $|\theta_l(t)\rangle$ non occupés ($l > N$). Cette stationnarité est donc obtenue si, pour toutes les valeurs de k allant de 1 à N , on a :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\theta_k(t)\rangle = \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1(t) + W_{HF}(t) \right] |\theta_k(t)\rangle + |\xi_k(t)\rangle \quad (35)$$

où le ket $|\xi_k(t)\rangle$ est une combinaison linéaire quelconque des états occupés $|\theta_l(t)\rangle$ ($l \leq N$). Mais nous avons déjà noté au début du § 4 qu'ajouter à l'un des $|\theta_k(t)\rangle$ une composante sur les états individuels déjà occupés n'a aucun effet sur l'état à N particules (à part un changement éventuel de phase), et donc aucune influence sur la valeur de S ; la stationnarité de cette fonctionnelle ne dépend donc pas de la valeur du ket $|\xi_k(t)\rangle$, qui peut tout aussi bien être quelconque, par exemple le ket nul.

Pour finir, si les $|\theta_n(t)\rangle$ sont égaux aux solutions $|\varphi_n(t)\rangle$ des N équations :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi_n(t)\rangle = \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V_1(t) + W_{HF}(t) \right] |\varphi_n(t)\rangle \quad (36)$$

la fonctionnelle S est effectivement stationnaire à chaque instant. De plus, nous avons vu au Complément E_{XV} que $W_{HF}(t)$ est hermitique, de sorte que l'opérateur au second membre du second membre de (36) est lui aussi hermitique. Il en découle que les N kets $|\varphi_n(t)\rangle$ subissent une évolution similaire à celle d'une évolution de Schrödinger habituelle, décrite par un opérateur d'évolution unitaire (Complément F_{III}). Un tel opérateur ne change ni la norme ni les produits scalaires des kets. Donc, si, initialement les kets $|\varphi_n(t)\rangle$ constituent un ensemble orthonormé, cela reste vrai à tout instant ultérieur. L'ensemble du calcul que nous avons effectué est donc cohérent ; en particulier, nous vérifions que le vecteur d'état à N particules $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle$ ne change pas de norme au cours du temps.

Les relations (36) constituent les équations de Hartree-Fock dépendantes du temps. Elles montrent comment l'introduction de l'opérateur de champ moyen à une particule permet, non seulement de calculer des niveaux d'énergie stationnaires, mais aussi de traiter des problèmes dépendant du temps.

4-b. Particules dans un seul état de spin

Un cas particulier est celui de fermions se trouvant tous dans le même état de spin, comme nous l'avons supposé au § 1 du Complément E_{XV}. Nous pouvons alors écrire les équations de Hartree-Fock en termes de fonctions d'onde sous la forme :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_n(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}) + V_{\text{dir}}(\mathbf{r}; t) \right] \varphi_n(\mathbf{r}, t) - \int d^3 r' V_{\text{ex}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) \varphi_n(\mathbf{r}', t) \quad (37)$$

avec les définitions (46) de ce complément des potentiels direct et d'échange, qui maintenant dépendent du temps. Le lien étroit entre méthodes de Hartree-Fock dépendante ou indépendante du temps est donc évident.

4-c. Discussion

Comme pour la recherche d'un état fondamental au moyen des équations de Hartree-Fock indépendantes du temps, on constate une forte similarité entre les équations (36) et une équation de Schrödinger ordinaire pour une particule unique. Ici aussi, une résolution exacte des équations n'est en général pas possible, de sorte qu'il faut recourir à des approximations successives. Supposons par exemple que le potentiel extérieur dépendant du temps $V_1(t)$ soit nul jusqu'à l'instant t_0 et que, pour $t < t_0$, le système physique soit dans un état stationnaire. La théorie de Hartree-Fock indépendante du temps permet d'obtenir une approximation de cet état, et donc une série de valeurs initiales $|\varphi_n(t_0)\rangle$ pour les états individuels. Le potentiel de Hartree-Fock initial est donc également connu. Entre les instants t_0 et un instant ultérieur proche $t_0 + \Delta t$, l'équation d'évolution (36) permet ensuite de calculer l'effet du potentiel extérieur $V_1(t)$ sur les kets individuels, et donc d'obtenir les $|\varphi_n(t_0 + \Delta t)\rangle$. On peut alors calculer une nouvelle valeur du potentiel de Hartree-Fock, et s'en servir pour prolonger le calcul de l'évolution des $|\varphi_n(t)\rangle$ jusqu'à l'instant ultérieur $t_0 + 2\Delta t$. Procédant ainsi de proche en proche, on obtient cette évolution jusqu'à l'instant final t_1 . Bien sûr, une telle approche n'est précise que dans la mesure où Δt

est suffisamment petit pour que le potentiel de Hartree-Fock évolue très peu d'une étape temporelle à la suivante.

Une autre possibilité est de procéder de façon analogue à celle que nous avons décrite pour la recherche des états stationnaires : partir d'une première famille de kets orthonormés (ici dépendant du temps) qui ne semble pas trop éloignée de la solution recherchée sur tout l'intervalle de temps, et améliorer cette famille par itération. Par report dans (21), la première série de fonctions d'essai orthonormées conduit à une première approximation du potentiel de Hartree-Fock et de la dynamique associée. On résout alors l'équation dynamique correspondante à partir des mêmes conditions initiales en $t = t_0$, ce qui conduit à une nouvelle série de fonctions orthonormées. A nouveau, l'utilisation de (21) permet de calculer une valeur du potentiel de Hartree-Fock, a priori différente de la précédente ; on recommence alors la procédure précédente jusqu'au moment où la convergence semble satisfaisante.

Les applications de cette méthode sont très nombreuses, en particulier en physique atomique, moléculaire, et nucléaire. Elles permettent par exemple de calculer les oscillations du nuage électronique dans un atome, une molécule, ou dans un solide placé dans un champ électrique extérieur dépendant du temps (polarisabilité dynamique), ou encore les oscillations des nucléons dans un noyau. Nous avons signalé dans la conclusion du Complément E_{XV} que la méthode de Hartree-Fock indépendante du temps est parfois remplacée par la méthode de la densité fonctionnelle ; c'est également possible dans le cadre des problèmes dépendant du temps.

En conclusion de ce complément, nous pouvons souligner l'analogie étroite qui existe entre la théorie de Hartree-Fock du champ moyen indépendant ou dépendant du temps. Nous avons en effet vu que, dans les deux cas, apparaissent les mêmes opérateurs de potentiel de Hartree-Fock. On comprend donc que ces opérateurs soient d'usage général, même s'ils résultent d'une approximation.

Complément G_{XV}

Fermions ou bosons : équilibre thermique en champ moyen

1	Principe variationnel	130
1-a	Notations, position du problème	130
1-b	Une inégalité utile	131
1-c	Minimisation du potentiel thermodynamique	133
2	Approximation de l'opérateur densité à l'équilibre . .	134
2-a	Opérateurs densité d'essai	134
2-b	Fonction de partition, distributions	135
2-c	Grand potentiel variationnel	139
2-d	Optimisation	140
3	Equations de champ moyen dépendant de la température	144
3-a	Forme des équations	144
3-b	Propriétés et limites des équations	145
3-c	Différences avec les équations de Hartree-Fock à température nulle (fermions)	147
3-d	Limite de température nulle (fermions)	148
3-e	Equations pour les fonctions d'onde	148

La compréhension de l'équilibre thermodynamique d'un système de particules identiques en interaction est nécessaire dans de nombreux problèmes physiques : propriétés électroniques d'un conducteur ou semi-conducteur, propriétés de l'hélium liquide, des gaz ultra-froids, etc. Elle est essentielle pour l'étude des transitions de phase, dont les exemples sont multiples et variés en physique des solides et des liquides : magnétisme spontané apparaissant en dessous d'une certaine température, changements de conduction électrique, et bien d'autres. Or, en général, même si l'hamiltonien d'un système de particules identiques est connu, le calcul des propriétés de cet équilibre ne peut être mené exactement jusqu'au bout ; ce calcul présente en effet de réelles difficultés de manipulation de vecteurs d'état et opérateurs d'interaction, qui mettent en jeu des combinaisons non triviales d'opérateurs de création et d'annihilation. Il faut donc recourir à une ou plusieurs approximations. La plus fréquente est probablement l'approximation du champ moyen qui, comme nous l'avons vu au Complément E_{XV} , constitue le fondement de la méthode de Hartree-Fock. Dans ce complément, nous avons montré comment la méthode permet d'obtenir des valeurs approchées des niveaux d'énergie d'un système de particules en interaction ; le raisonnement a été fait en termes de vecteurs d'état. Ici, nous abordons le problème plus complexe de l'équilibre thermique, qui doit se traiter en termes d'opérateur densité, et montrons comment la méthode de Hartree-Fock peut être étendue à ce cas plus général.

Nous verrons que, grâce à cette approche, il est effectivement possible d'obtenir des formules compactes fournissant une valeur approchée de l'opérateur densité à

l'équilibre thermique, dans le cadre de l'ensemble grand-canonique. Les équations à résoudre restent relativement semblables¹ à celles du Complément E_{XV}. La méthode de Hartree-Fock fournit également une valeur du grand potentiel thermodynamique, qui donne directement la pression du système ; les autres grandeurs thermodynamiques peuvent ensuite être obtenues par dérivations partielles par rapport aux paramètres de l'équilibre (volume, température, potentiel chimique, éventuellement champ extérieur appliqué, etc. – cf. Appendice VI). La méthode est donc très puissante, mais elle reste bien sûr une approximation dans la mesure où les interactions entre particules ne sont traitées que dans le cadre du champ moyen, où certaines corrélations ne sont pas prises en compte. De plus, pour des bosons, elle reste limitée aux systèmes physiques loin de la condensation de Bose-Einstein ; les raisons de cette limitation seront discutées en détail dans le § 4-a du Complément H_{XV}.

Dans un premier temps (§ 1), une fois rappelées les notations et quelques généralités, nous établissons un principe variationnel qui s'applique à tout opérateur densité ; ce principe permet de rechercher, dans une famille quelconque d'opérateurs, celui qui s'approche au mieux de l'opérateur densité de l'équilibre thermique. Puis (§ 2) nous introduirons une famille d'opérateurs densité d'essai dont la forme reflète l'approximation du champ moyen ; nous appliquerons le principe variationnel pour déterminer lequel dans cette famille est l'opérateur optimal. Nous obtiendrons ainsi les équations de Hartree-Fock à température non nulle, dont certaines propriétés seront étudiées dans une dernière partie (§ 3). Plusieurs applications de ces équations seront présentées au Complément H_{XV}.

L'idée générale et l'organisation des calculs restera la même qu'au Complément E_{XV}, dont nous reprenons les notations : on part d'un critère variationnel, on choisit une famille d'essai, et on optimise la description du système au sein de cette famille. C'est pourquoi, bien que le présent complément soit rédigé comme un tout indépendant, il peut s'avérer utile de lire auparavant le Complément E_{XV}.

1. Principe variationnel

Commençons par introduire les notations, afin de mettre en œuvre un certain nombre de résultats généraux de mécanique statistique quantique (dont on trouvera un résumé plus détaillé dans l'Appendice VI).

1-a. Notations, position du problème

Nous supposons que l'hamiltonien a la forme :

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}_{\text{ext}} + \widehat{W}_{\text{int}} \quad (1)$$

qui est la somme de l'énergie cinétique \widehat{H}_0 des particules, de leur énergie de couplage \widehat{V}_{ext} avec un potentiel extérieur :

$$\widehat{V}_{\text{ext}} = \sum_q V_1(q) \quad (2)$$

1. Elles ne sont cependant pas la simple juxtaposition des équations de ce complément : on pourrait en effet envisager d'écrire indépendamment ces équations pour chacun des niveaux d'énergie, puis d'effectuer ensuite une moyenne thermique. Mais nous allons voir (par exemple au § 2-d-β) que la détermination de la position de chaque niveau fait déjà intervenir des moyennes thermiques, de sorte qu'ils sont couplés.

et de leur interaction mutuelle \widehat{W}_{int} . Cette dernière s'écrit :

$$\widehat{W}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{q \neq q'} W_2(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) \quad (3)$$

Nous allons utiliser l'ensemble "grand-canonique" (Appendice VI, § 1-c), où le nombre de particules n'est pas fixé, mais prend une valeur moyenne déterminée par le potentiel chimique μ . Dans ce cas, l'opérateur densité ρ est un opérateur agissant dans tout l'espace de Fock \mathcal{E}_F (où N peut prendre toutes les valeurs possibles), et pas seulement dans l'espace des états \mathcal{E}_N à N particules (qui est plus restreint puisque N y reste fixé). On pose, comme habituellement :

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (4)$$

où k_B est la constante de Boltzmann et T la température absolue. A l'équilibre grand-canonique, l'opérateur densité du système dépend de deux paramètres, β et le potentiel chimique μ , et s'écrit :

$$\rho_{\text{eq}} = \frac{1}{Z} \exp \left[-\beta \left(\widehat{H} - \mu \widehat{N} \right) \right] \quad (5)$$

avec la relation qui découle de la normalisation à 1 de la trace de ρ_{eq} :

$$Z = \text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(\widehat{H} - \mu \widehat{N} \right) \right] \right\} \quad (6)$$

La fonction Z est appelée "fonction de partition" grand-canonique. L'opérateur \widehat{N} associé au nombre total de particules est défini en (B-17) dans le Chapitre XV. La température T et le potentiel chimique μ sont deux grandeurs intensives, conjuguées respectivement de l'énergie et du nombre de particules.

Du fait de l'existence des interactions, ces formules conduisent généralement à des calculs trop compliqués pour être menés jusqu'au bout. Le but de ce complément est donc de chercher des expressions approchées de ρ_{eq} et Z qui soient plus facilement utilisables, et qui découlent de l'approximation du champ moyen.

1-b. Une inégalité utile

Considérons deux opérateurs densité ρ et ρ' , tous deux de trace unité :

$$\text{Tr} \{ \rho \} = \text{Tr} \{ \rho' \} = 1 \quad (7)$$

Nous allons montrer que l'on a toujours :

$$\text{Tr} \{ \rho \text{Log} \rho \} \geq \text{Tr} \{ \rho \text{Log} \rho' \} \quad (8)$$

Pour cela, commençons par remarquer que la fonction $x \text{Log} x$, définie pour $x \geq 0$, est toujours supérieure à la fonction $x - 1$, qui donne l'équation de sa tangente en $x = 1$ (Fig. 1). Lorsque x et y sont positifs, on a donc toujours :

$$\frac{x}{y} \text{Log} \frac{x}{y} \geq \frac{x}{y} - 1 \quad (9)$$

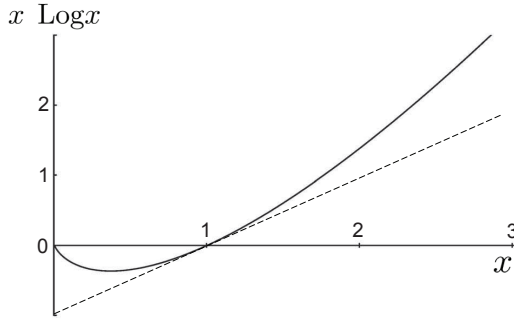


FIGURE 1 – Représentation des variations de la fonction $x \text{ Log} x$. La courbe est tangente en $x = 1$ à la droite $y = x - 1$ (traits tiretés) et reste toujours au-dessus ; la valeur de la fonction reste donc toujours supérieure à $x - 1$.

soit, en multipliant par y :

$$x \text{ Log} x - x \text{ Log} y \geq x - y \tag{10}$$

avec égalité seulement si $x = y$.

Appelons maintenant p_n les valeurs propres de ρ correspondant aux vecteurs propres normés $|u_n\rangle$, et p'_m les valeurs propres de ρ' correspondant aux vecteurs propres normés $|v_m\rangle$. Appliquée aux nombres positifs p_n et p'_m , la relation (10) donne :

$$p_n \text{ Log} p_n - p_n \text{ Log} p'_m \geq p_n - p'_m \tag{11}$$

Multiplions alors cette relation par le carré du module du produit scalaire :

$$|\langle u_n | v_m \rangle|^2 = \langle u_n | v_m \rangle \langle v_m | u_n \rangle \tag{12}$$

et sommions sur m et n . Pour le terme en $p_n \text{ Log} p_n$ de (11), la sommation sur m fait apparaître dans (12) la décomposition de l'opérateur identité sur la base $\{|v_m\rangle\}$; il vient alors $\langle u_n | u_n \rangle = 1$, et l'on obtient simplement la somme sur n de $p_n \text{ Log} p_n$, soit la trace $\text{Tr}\{\rho \text{ Log} \rho\}$. Pour le terme en $p_n \text{ Log} p'_m$, la sommation sur m introduit :

$$\sum_m \text{Log} p'_m |v_m\rangle \langle v_m| = \text{Log} \rho' \tag{13}$$

de sorte qu'il vient :

$$\sum_n \langle u_n | p_n \text{ Log} \rho' | u_n \rangle = \text{Tr} \{ \rho \text{ Log} \rho' \} \tag{14}$$

Quant aux termes de droite dans l'inégalité, le terme en p_n donne :

$$\sum_{m,n} \langle v_m | u_n \rangle p_n \langle u_n | v_m \rangle = \sum_m \langle v_m | \rho | v_m \rangle = \text{Tr} \{ \rho \} = 1 \quad (15)$$

et celui en p'_m donne également 1 pour les mêmes raisons, de sorte que les deux termes s'annulent mutuellement. Pour finir, nous obtenons l'inégalité :

$$\text{Tr} \{ \rho \text{Log} \rho \} - \text{Tr} \{ \rho \text{Log} \rho' \} \geq 0 \quad (16)$$

qui démontre (8).

Remarque :

On peut se demander à quelles conditions l'égalité est réalisée. Il faut, pour cela, que (11) se transforme en égalité, donc que $p_n = p'_m$ chaque fois que le produit scalaire (12) est non nul ; toutes les valeurs propres des deux opérateurs ρ et ρ' doivent donc être égales. De plus, les vecteurs propres des deux opérateurs correspondant à des valeurs propres différentes doivent avoir un produit scalaire nul ; en d'autres termes, les valeurs propres et les sous-espaces propres des deux opérateurs sont les mêmes, ce qui revient à dire que $\rho = \rho'$.

1-c. Minimisation du potentiel thermodynamique

L'entropie S associée à un opérateur densité quelconque ρ de trace unité est définie par la relation (6) de l'Appendice VI :

$$S = -k_B \text{Tr} \{ \rho \text{Log} \rho \} \quad (17)$$

Le potentiel thermodynamique de l'ensemble grand-canonique est défini par le "grand potentiel" Φ qui s'exprime en fonction de ρ par la relation (Appendice VI, § 1.c.β) :

$$\Phi = \langle \hat{H} \rangle - TS - \mu \langle \hat{N} \rangle = \text{Tr} \left\{ \left[\hat{H} + k_B T \text{Log} \rho - \mu \hat{N} \right] \rho \right\} \quad (18)$$

La valeur Φ_{eq} de Φ à l'équilibre s'obtient directement à partir de la fonction de partition Z , puisque le report de (5) dans (18) donne :

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{eq}} &= \text{Tr} \left\{ \left[\hat{H} + \beta^{-1} \left(-\beta \hat{H} + \beta \mu \hat{N} - \text{Log} Z \right) - \mu \hat{N} \right] \rho_{\text{eq}} \right\} \\ &= -\beta^{-1} \text{Log} Z \text{Tr} \{ \rho_{\text{eq}} \} = -k_B T \text{Log} Z \end{aligned} \quad (19)$$

Ainsi :

$$Z = e^{-\beta \Phi_{\text{eq}}} \quad \text{soit} \quad \Phi_{\text{eq}} = -k_B T \text{Log} Z \quad (20)$$

Prenons alors un opérateur densité ρ quelconque, et la fonction Φ associée, obtenue à partir de (18). Comme, d'après (5) et (20) :

$$-\beta \left(\langle \hat{H} \rangle - \mu \langle \hat{N} \rangle \right) = \text{Log} \rho_{\text{eq}} + \text{Log} Z = \text{Log} \rho_{\text{eq}} - \beta \Phi_{\text{eq}} \quad (21)$$

le report dans (18) donne :

$$\Phi = \text{Tr} \{ \beta^{-1} [-\text{Log} \rho_{\text{eq}} + \beta \Phi_{\text{eq}} + \text{Log} \rho] \rho \} = \beta^{-1} \text{Tr} \{ [-\text{Log} \rho_{\text{eq}} + \text{Log} \rho] \rho \} + \Phi_{\text{eq}}$$

(22)

Mais la relation (16), appliquée à $\rho' = \rho_{\text{eq}}$, permet d'écrire :

$$\text{Tr} \{ [\text{Log} \rho - \text{Log} \rho_{\text{eq}}] \rho \} \geq 0 \quad (23)$$

Ainsi on déduit de (22) que, quel que soit l'opérateur densité ρ de trace 1, on a :

$$\Phi \geq \Phi_{\text{eq}} \quad (24)$$

avec égalité si, et seulement si, $\rho = \rho_{\text{eq}}$.

La relation (24) nous permet donc de poser un principe variationnel : on choisit une famille d'opérateurs densité ρ , de trace unité, et on recherche dans cette famille quel est l'opérateur qui donne la valeur la plus faible à Φ . Cet opérateur est alors l'opérateur optimal au sein de la famille. De plus, il fournit une majoration du grand potentiel, avec une erreur qui est du second ordre par rapport à l'erreur qui a été faite sur ρ .

2. Approximation de l'opérateur densité à l'équilibre

Munis de ce principe variationnel, nous allons maintenant l'appliquer en choisissant une famille d'opérateurs densité qui rende les calculs accessibles.

2-a. Opérateurs densité d'essai

La méthode de Hartree-Fock est basée sur l'hypothèse qu'une bonne approximation du problème est donnée en considérant que chaque particule reste indépendante des autres, tout en se déplaçant dans un potentiel moyen que celles-ci créent. L'approximation consiste donc à calculer l'opérateur densité comme si l'hamiltonien \hat{H} était remplacé par une somme d'hamiltoniens $\tilde{h}(q)$ de particules indépendantes :

$$\tilde{H} = \sum_{q=1}^N \tilde{h}(q) \quad (25)$$

Introduisons la base des opérateurs de création et d'annihilation associée aux vecteurs propres de l'opérateur à une particule \tilde{h} :

$$a_k^\dagger |0\rangle = |\widetilde{\theta}_k\rangle \quad \text{avec} \quad \widetilde{h}|\widetilde{\theta}_k\rangle = \tilde{e}_k|\widetilde{\theta}_k\rangle \quad (26)$$

L'opérateur symétrique à une particule \tilde{H} peut s'écrire selon la relation (B-14) du Chapitre XV :

$$\tilde{H} = \sum_k \tilde{e}_k a_k^\dagger a_k \quad (27)$$

où les constantes réelles \tilde{e}_k sont les valeurs propres de l'opérateur \tilde{h} .

Nous choisissons comme opérateurs d'essai agissant dans l'espace de Fock l'ensemble des opérateurs $\tilde{\rho}$ qui peuvent s'écrire sous la forme de celle d'un équilibre

dans l'ensemble grand-canonique – cf. relation (42) de l'Appendice VI. Nous posons donc :

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{\tilde{Z}} \exp \left[-\beta \left(\tilde{H} - \mu \hat{N} \right) \right] \quad (28)$$

où \tilde{H} est un opérateur symétrique quelconque à une particule, la constante β l'inverse de la température définie en (4), μ une constante réelle qui joue le rôle d'un potentiel chimique, et \tilde{Z} la trace de $\tilde{\rho}$:

$$\tilde{Z} = \text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(\tilde{H} - \mu \hat{N} \right) \right] \right\} \quad (29)$$

Les variables pertinentes de notre problème sont donc les états $|\widetilde{\theta}_k\rangle$, qui constituent une base orthonormée arbitraire dans l'espace des états individuels, ainsi que les énergies \tilde{e}_k . Ces variables déterminent les a_k ainsi que \tilde{H} , et il s'agit donc de trouver leur valeur qui minimise la fonction :

$$\tilde{\Phi} = \text{Tr} \left\{ \left[\hat{H} + k_B T \text{Log} \tilde{\rho} - \mu \hat{N} \right] \tilde{\rho} \right\} \quad (30)$$

Compte tenu de (27) et (28), on a :

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{\tilde{Z}} \exp \left[- \sum_k \beta (\tilde{e}_k - \mu) a_k^\dagger a_k \right] \quad (31)$$

Les calculs qui suivent sont simplifiés par le fait que l'espace de Fock peut être considéré comme le produit tensoriel d'espaces indépendants associés aux états individuels $|\widetilde{\theta}_k\rangle$; l'opérateur densité d'essai (28) s'écrit alors comme un produit tensoriel d'opérateurs agissant chacun sur un seul mode k :

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{\tilde{Z}} \prod_k \exp \left[-\beta (\tilde{e}_k - \mu) a_k^\dagger a_k \right] \quad (32)$$

2-b. Fonction de partition, distributions

La forme de l'égalité (32) est la même que celle de la relation (5) du Complément B_{XV}, avec un simple changement : le remplacement des énergies de particules libres $e_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ par des énergies \tilde{e}_k , qui sont pour le moment inconnues. Ce changement n'affectant pas la structure mathématique de l'opérateur densité, nous allons donc pouvoir utiliser directement les résultats des calculs du Complément B_{XV}.

α. Fonction de partition variationnelle

La fonction \tilde{Z} ne dépend que des énergies variationnelles \tilde{e}_k , puisque la trace de (32) peut être calculée dans la base des $\{|\widetilde{\theta}_k\rangle\}$, avec pour résultat :

$$\tilde{Z} = \prod_k \sum_{n_k} \exp \left[-n_k \beta (\tilde{e}_k - \mu) \right] \quad (33)$$

On obtient donc simplement une expression similaire à celle de la relation (7) du Complément B_{XV}, qui concerne le gaz parfait. Pour des fermions, n_k ne peut prendre que les valeurs 0 et 1, et il vient :

$$\tilde{Z}_{fermions} = \prod_k \left[1 + e^{-\beta(\tilde{\epsilon}_k - \mu)} \right] \quad (34)$$

alors que pour des bosons n_k varie de 0 à l'infini, de sorte que :

$$\tilde{Z}_{bosons} = \prod_k \frac{1}{1 - e^{-\beta(\tilde{\epsilon}_k - \mu)}} \quad (35)$$

Dans les deux cas, nous avons :

$$\text{Log} \tilde{Z} = -\eta \sum_k \text{Log} \left[1 - \eta e^{-\beta(\tilde{\epsilon}_k - \mu)} \right] \quad (36)$$

avec $\eta = +1$ pour des bosons, $\eta = -1$ pour des fermions.

Le calcul de l'entropie se mènerait de façon semblable : le fait que l'opérateur densité $\tilde{\rho}$ ait la même forme que celle qui décrit l'équilibre thermique d'un gaz parfait permet d'étendre immédiatement à un système décrit par $\tilde{\rho}$ les formules donnant l'entropie d'un système sans interactions.

β . Une particule, opérateur densité réduit

Calculons la valeur moyenne de $a_i^\dagger a_j$ avec l'opérateur densité $\tilde{\rho}$:

$$\left\langle a_i^\dagger a_j \right\rangle_{\tilde{\rho}} = \text{Tr} \left\{ a_i^\dagger a_j \tilde{\rho} \right\} \quad (37)$$

Le § 2-c du Complément B_{XV} indique que :

$$\text{Tr} \left\{ a_i^\dagger a_j \tilde{\rho} \right\} = \delta_{ij} f_\beta(\tilde{\epsilon}_i - \mu) \quad (38)$$

où la fonction de distribution f_β est notée f_β^{FD} pour des fermions, et f_β^{BE} pour des bosons :

$$f_\beta(e - \mu) = \begin{cases} f_\beta^{FD}(e - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(e - \mu)} + 1} & \text{pour des fermions} \\ f_\beta^{BE}(e - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(e - \mu)} - 1} & \text{pour des bosons} \end{cases} \quad (39)$$

Lorsque le système est décrit par l'opérateur densité $\tilde{\rho}$, les populations moyennes des états individuels $|\widetilde{\theta}_k\rangle$ sont donc déterminées par les distributions habituelles de Fermi-Dirac ou de Bose-Einstein. A partir de maintenant, pour simplifier la notation, nous noterons simplement $|\theta_k\rangle$ les kets $|\widetilde{\theta}_k\rangle$.

On peut introduire un "opérateur densité réduit à une particule" $\tilde{\rho}_1(1)$ par ² :

$$\tilde{\rho}_1(1) = \sum_k f_\beta(\tilde{\epsilon}_k - \mu) |1 : \theta_k\rangle \langle 1 : \theta_k| \quad (40)$$

2. La trace de cet opérateur réduit n'est pas égale à l'unité, contrairement à ce qui est habituellement le cas pour un opérateur densité ; elle est égale au nombre moyen de particules – cf. relation (44). Cette autre normalisation s'avère souvent plus commode pour l'étude des systèmes composés d'un grand nombre de particules.

où la dépendance (1) et l'indice 1 sont là pour bien mettre en évidence qu'il s'agit d'un opérateur agissant dans l'espace des états d'une seule particule (contrairement à $\tilde{\rho}$ qui agit dans l'espace de Fock); il va sans dire que cet indice n'a rien à voir avec la numérotation initiale des particules, mais désigne une particule unique quelconque parmi toutes celles du système. Les éléments diagonaux de $\tilde{\rho}_1(1)$ sont les populations des états individuels. Cet opérateur permet de calculer les valeurs moyennes sur $\tilde{\rho}$ de tous les opérateurs à une particule \widehat{M} :

$$\langle \widehat{M} \rangle_{\tilde{\rho}} = \text{Tr} \left\{ \widehat{M} \tilde{\rho} \right\} \quad (41)$$

En effet, utilisant l'expression (B-12) du Chapitre XV d'un opérateur à une particule quelconque³, ainsi que (38), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle \widehat{M} \rangle_{\tilde{\rho}} &= \sum_{k,l} \langle \theta_k | \widehat{m} | \theta_l \rangle \text{Tr} \left\{ a_k^\dagger a_l \tilde{\rho} \right\} = \sum_k \langle \theta_k | \widehat{m} | \theta_k \rangle f_\beta(\tilde{\epsilon}_k - \mu) \\ &= \sum_k \langle \theta_k | \widehat{m} \tilde{\rho}_1(1) | \theta_k \rangle \end{aligned} \quad (42)$$

soit :

$$\langle \widehat{M} \rangle_{\tilde{\rho}} = \text{Tr}_1 \left\{ \widehat{m} \tilde{\rho}_1(1) \right\} \quad (43)$$

L'utilisation de l'opérateur densité $\tilde{\rho}_1(1)$ est commode car, comme nous le verrons, il permet d'obtenir de façon simple toutes les valeurs moyennes qui interviennent dans les calculs de Hartree-Fock; notre calcul des variations reviendra donc simplement à varier $\tilde{\rho}_1(1)$. Cet opérateur résume en quelque sorte les propriétés de l'opérateur densité variationnel $\tilde{\rho}$ choisi en (28) dans l'espace de Fock; il joue le même rôle⁴ que, dans le Complément E_{XV}, le projecteur P_N (qui résume l'essentiel du ket variationnel à N particules). De façon générale, on peut dire que le principe général de la méthode de Hartree-Fock consiste à ramener les fonctions de corrélation binaires du système à des produits de fonctions de corrélation concernant une seule particule (nous reviendrons plus en détail sur ce point au § 2-b du Complément C_{XVI}).

La valeur moyenne de l'opérateur \widehat{N} correspondant au nombre total de particules s'écrit :

$$\langle \widehat{N} \rangle_{\tilde{\rho}} = \text{Tr} \left\{ \widehat{N} \tilde{\rho} \right\} = \text{Tr}_1 \left\{ \tilde{\rho}_1(1) \right\} = \sum_{i=1}^{\infty} f_\beta(\tilde{\epsilon}_i - \mu) \quad (44)$$

Les deux fonctions f_β^{FD} et f_β^{BE} sont croissantes en fonction de μ et, pour chaque température, le nombre total de particules est contrôlé par le potentiel chimique. Pour un grand système physique dont les niveaux d'énergie sont très proches, la partie orbitale de la somme discrète de (44) peut être remplacée par une intégrale. La Figure 1 du Complément B_{XV} donne l'allure des distributions de Fermi-Dirac et

3. Nous changeons les notations \widehat{F} et \widehat{f} du Chapitre XV en \widehat{M} et \widehat{m} afin d'éviter toute confusion avec les fonctions de distribution f_β .

4. Pour des fermions, à la limite où la température tend vers zéro, la fonction de distribution f_β^{FD} qui intervient dans la définition de $\rho_I(1)$ devient une fonction palier, et $\rho_I(1)$ se confond effectivement avec $P_N(1)$.

de Bose-Einstein. Nous avons également noté que, pour les systèmes de bosons, le potentiel chimique ne peut excéder la plus petite valeur e_0 parmi celles des énergies e_l ; lorsqu'il s'en approche, la population du niveau correspondant diverge, ce qui correspond au phénomène de condensation de Bose-Einstein sur lequel nous reviendrons au complément suivant. En revanche, avec des fermions, le potentiel chimique n'a pas de limite supérieure, la population des états d'énergie inférieure à μ ne pouvant dépasser 1 quelle que soit sa valeur.

γ . *Deux particules, fonctions de distribution*

Considérons un opérateur à deux particules \widehat{G} arbitraire, et calculons sa valeur moyenne avec l'opérateur densité $\tilde{\rho}$. La relation (C-16) du Chapitre XV fournit l'expression générale d'un opérateur symétrique à deux particules, qui conduit ici à :

$$\langle \widehat{G} \rangle_{\tilde{\rho}} = \text{Tr} \left\{ \widehat{G} \tilde{\rho} \right\} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle 1 : \theta_i; 2 : \theta_j | \widehat{g}(1, 2) | 1 : \theta_k; 2 : \theta_l \rangle \text{Tr} \left\{ a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \tilde{\rho} \right\} \quad (45)$$

La démarche que nous allons suivre est la même que celle du § 2-a du Complément E_{XV} : nous utilisons l'approximation du champ moyen pour ramener le calcul d'une valeur moyenne d'un opérateur à deux particules à celui de valeurs moyennes à une seule particule. Pour cela, nous pouvons par exemple utiliser la relation (43) du Complément B_{XV}, qui indique que :

$$\text{Tr} \left\{ a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \tilde{\rho} \right\} = [\delta_{ik} \delta_{jl} + \eta \delta_{il} \delta_{jk}] f_\beta(\tilde{e}_i - \mu) f_\beta(\tilde{e}_j - \mu) \quad (46)$$

Il vient alors :

$$\langle \widehat{G} \rangle_{\tilde{\rho}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} f_\beta(\tilde{e}_i - \mu) f_\beta(\tilde{e}_j - \mu) \times \left[\langle 1 : \theta_i; 2 : \theta_j | \widehat{g}(1, 2) | 1 : \theta_i; 2 : \theta_j \rangle + \eta \langle 1 : \theta_i; 2 : \theta_j | \widehat{g}(1, 2) | 1 : \theta_j; 2 : \theta_i \rangle \right] \quad (47)$$

que, d'après (40), nous pouvons également écrire sous la forme :

$$\langle \widehat{G} \rangle_{\tilde{\rho}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle 1 : \theta_i | \tilde{\rho}_1(1) | 1 : \theta_i \rangle \langle 2 : \theta_j | \tilde{\rho}_1(2) | 2 : \theta_j \rangle \times \langle 1 : \theta_i; 2 : \theta_j | \widehat{g}(1, 2) [1 + \eta P_{\text{ex}}(1, 2)] | 1 : \theta_i; 2 : \theta_j \rangle \quad (48)$$

où P_{ex} est l'opérateur d'échange entre les particules 1 et 2. Comme :

$$\begin{aligned} \langle 1 : \theta_i | \tilde{\rho}_1(1) | 1 : \theta_i \rangle \langle 2 : \theta_j | \tilde{\rho}_1(2) | 2 : \theta_j \rangle \\ = \langle 1 : \theta_i; 2 : \theta_j | \tilde{\rho}_1(1) \otimes \tilde{\rho}_1(2) | 1 : \theta_i; 2 : \theta_j \rangle \end{aligned} \quad (49)$$

et comme les opérateurs $\tilde{\rho}_1(1)$ et $\tilde{\rho}_1(2)$ sont diagonaux dans la base des $|\theta_i\rangle$, il apparaît au second membre de (48) l'expression :

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle 1 : \theta_i; 2 : \theta_j | [\tilde{\rho}_1(1) \otimes \tilde{\rho}_1(2)] \widehat{g}(1, 2) [1 + \eta P_{\text{ex}}(1, 2)] | 1 : \theta_i; 2 : \theta_j \rangle \quad (50)$$

qui n'est autre qu'une (double) trace sur deux particules 1 et 2. Il vient donc :

$$\langle \widehat{G} \rangle_{\tilde{\rho}} = \frac{1}{2} \text{Tr}_{1,2} \{ [\tilde{\rho}_1(1) \otimes \tilde{\rho}_1(2)] \widehat{g}(1,2) [1 + \eta P_{\text{ex}}(1,2)] \} \quad (51)$$

Ainsi, comme nous l'avions annoncé plus haut, la valeur moyenne de l'opérateur à deux particules \widehat{G} peut-elle s'exprimer, dans le cadre de l'approximation de Hartree-Fock, en fonction de l'opérateur densité réduit à une particule $\tilde{\rho}_1(1)$; cette relation n'est pas linéaire.

Remarque :

L'analogie avec les calculs du Complément E_{XV} est soulignée si nous regroupons ses équations (57) et (58) pour écrire :

$$\langle \widehat{W}_{\text{int}} \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr}_{1,2} \{ [P_N(1) \otimes P_N(2)] W_2(1,2) [1 + \eta P_{\text{ex}}(1,2)] \} \quad (52)$$

Une fois $W_2(1,2)$ remplacé par G , on obtient une relation très semblable à (51), la seule différence étant que les projecteurs P_N sont à remplacer par des opérateurs à une particule $\tilde{\rho}_1$. Nous reviendrons sur la correspondance entre résultats à température nulle et non nulle au § 3-d.

2-c. Grand potentiel variationnel

Nous devons maintenant calculer le grand potentiel $\tilde{\Phi}$ écrit en (30). Comme la forme exponentielle (28) de l'opérateur d'essai fournit immédiatement l'expression de $\text{Log} \tilde{\rho}$, on constate la disparition des termes en $\mu \widehat{N}$, et il vient :

$$\tilde{\Phi} = \text{Tr} \left\{ \left[\widehat{H} - \tilde{H} \right] \tilde{\rho} \right\} - k_B T \text{Log} \tilde{Z} \quad (53)$$

Il faut donc évaluer la valeur moyenne, avec l'opérateur densité $\tilde{\rho}$, de la différence des hamiltoniens \widehat{H} et \tilde{H} définis respectivement par (1) et par (25).

Calculons en premier lieu la trace :

$$\text{Tr} \left\{ \widehat{H} \tilde{\rho} \right\} = \langle \widehat{H} \rangle_{\tilde{\rho}} \quad (54)$$

en commençant par la contribution de l'énergie cinétique \widehat{H}_0 dans (1). Nous notons K_0 l'opérateur énergie cinétique individuelle :

$$K_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} \quad (55)$$

(m est la masse des particules). L'égalité (43) appliquée à \widehat{H}_0 fournit immédiatement la valeur moyenne de l'énergie cinétique dans $\tilde{\rho}$:

$$\langle \widehat{H}_0 \rangle_{\tilde{\rho}} = \text{Tr}_1 \{ K_0 \tilde{\rho}_1(1) \} = \sum_i \langle \theta_i | K_0 | \theta_i \rangle \times f_\beta(\tilde{\epsilon}_i - \mu) \quad (56)$$

Ce résultat s'interprète simplement : chaque état individuel contribue par son énergie cinétique moyenne multipliée par sa population.

Le calcul de la valeur moyenne $\langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle_{\tilde{\rho}}$ se déroule de même :

$$\langle \widehat{V}_{\text{ext}} \rangle_{\tilde{\rho}} = \text{Tr}_1 \{ V_1 \tilde{\rho}_1(1) \} = \sum_i \langle \theta_i | V_1 | \theta_i \rangle \times f_\beta(\tilde{e}_i - \mu) \quad (57)$$

(comme dans le Complément E_{XV}, l'opérateur V_1 désigne l'opérateur potentiel extérieur à une particule).

Pour compléter le calcul de la valeur moyenne de \widehat{H} , nous devons maintenant calculer la trace $\text{Tr} \{ W_{\text{int}} \tilde{\rho} \}$, valeur moyenne de l'énergie d'interaction lorsque le système est décrit par $\tilde{\rho}$. La relation (51) nous permet d'écrire cette valeur moyenne sous la forme d'une double trace :

$$\langle W_{\text{int}} \rangle_{\tilde{\rho}} = \frac{1}{2} \text{Tr}_{1,2} \{ \tilde{\rho}_1(1) \otimes \tilde{\rho}_1(2) [W_2(1,2)] [1 + \eta P_{\text{ex}}(1,2)] \} \quad (58)$$

Reste enfin à obtenir la valeur moyenne de \widehat{H} . Le calcul est simplifié par le fait que \widehat{H} est, comme \widehat{H}_0 , un opérateur à une particule ; de plus, les $|\theta_i\rangle$ sont par définition les vecteurs propres de \tilde{h} avec les valeurs propres \tilde{e}_i , cf. relation (26). Si donc nous remplaçons dans (56), \widehat{H}_0 par \widehat{H} , nous obtenons :

$$\langle \widehat{H} \rangle_{\tilde{\rho}} = \sum_i \langle \theta_i | (\tilde{e}_i) | \theta_i \rangle \times f_\beta(\tilde{e}_i - \mu) = \sum_i \tilde{e}_i f_\beta(\tilde{e}_i - \mu) \quad (59)$$

Regroupons tous les résultats précédents en leur adjoignant la relation (36) ; nous obtenons ainsi la valeur du grand potentiel variationnel sous la forme de la somme de trois termes :

$$\tilde{\Phi} = \tilde{\Phi}_1 + \tilde{\Phi}_2 + \tilde{\Phi}_3 \quad (60)$$

avec :

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_1 &= \text{Tr}_1 \left\{ [K_0 + V_1] \tilde{\rho}_1(1) \right\} \\ \tilde{\Phi}_2 &= \frac{1}{2} \text{Tr}_{1,2} \left\{ [\tilde{\rho}_1(1) \otimes \tilde{\rho}_1(2)] W_2(1,2) [1 + \eta P_{\text{ex}}(1,2)] \right\} \\ \tilde{\Phi}_3 &= \sum_i \left\{ -\tilde{e}_i f_\beta(\tilde{e}_i - \mu) + \eta k_B T \text{Log} \left[1 - \eta e^{-\beta(\tilde{e}_i - \mu)} \right] \right\} \end{aligned} \quad (61)$$

2-d. Optimisation

Nous recherchons maintenant l'opérateur densité $\tilde{\rho}$ qui minimise la valeur moyenne $\tilde{\Phi}$ du potentiel ; pour cela nous faisons varier les énergies propres \tilde{e}_k ainsi que les états propres $|\theta_k\rangle$ de \widehat{H} . Nous commençons par la variation des états propres, qui n'induit aucune variation de $\tilde{\Phi}_3$. Le calcul reste en fait très semblable à celui du Complément E_{XV}, avec les mêmes étapes : variation des vecteurs d'état, puis démonstration que la condition de stationnarité est équivalente à une série d'équations aux valeurs propres pour un opérateur de Hartree-Fock (opérateur à une particule). Nous l'explicitons cependant ici parce qu'il est un peu différent. En particulier, contrairement à ce qui se produit dans le Complément E_{XV}, le nombre des états $|\theta_i\rangle$ à varier n'est plus fixé par le nombre de particules N ; ces états constituent

une base complète de l'espace des états individuels, et leur nombre peut être infini. On ne peut donc plus attribuer à l'un (ou plusieurs) d'entre eux une variation qui soit orthogonale à tous les autres $|\theta_j\rangle$; cette variation en sera nécessairement une combinaison linéaire. Dans un second temps, nous ferons varier les énergies $\tilde{\epsilon}_k$.

$\alpha.$ *Variations des états propres*

Lors des variations des états propres $|\theta_i\rangle$, nous devons conserver les relations d'orthogonalité :

$$\langle \theta_i | \theta_j \rangle = \delta_{ij} \tag{62}$$

L'idée la plus simple semblerait être de ne varier qu'un seul d'entre eux, $|\theta_l\rangle$ par exemple, par la substitution :

$$|\theta_l\rangle \Rightarrow |\theta_l\rangle + |d\theta_l\rangle \tag{63}$$

Pendant les conditions d'orthogonalité imposeraient alors :

$$\langle \theta_i | d\theta_l \rangle = 0 \quad \text{pour tout } i \neq l \tag{64}$$

qui interdirait à $|d\theta_l\rangle$ d'avoir une composante sur aucun $|\theta_i\rangle$ autre que $|\theta_l\rangle$, et contraindrait donc $|d\theta_l\rangle$ à rester colinéaire à $|\theta_l\rangle$. Comme de plus $|\theta_l\rangle$ doit rester normé, le seul changement possible serait alors celui de sa phase. Or un tel changement n'affecte en rien, ni l'opérateur densité $\tilde{\rho}_1(1)$, ni aucune valeur moyenne dans $\tilde{\rho}$. Cette variation est donc inopérante et sans intérêt.

Il est donc plus intéressant de faire varier conjointement deux vecteurs propres, que nous notons $|\theta_l\rangle$ et $|\theta_m\rangle$. Il devient alors possible de donner à $|\theta_l\rangle$ une composante sur $|\theta_m\rangle$, et inversement, ce qui ne modifie pas le sous-espace à deux dimensions qu'ils engendrent; leur orthogonalité à tous les autres vecteurs de base est automatiquement préservée. Nous attribuons ainsi aux deux vecteurs les variations infinitésimales suivantes (sans changement des énergies $\tilde{\epsilon}_l$ et $\tilde{\epsilon}_m$) :

$$\begin{cases} |d\theta_l\rangle = d\alpha e^{i\chi} |\theta_m\rangle \\ |d\theta_m\rangle = -d\alpha e^{-i\chi} |\theta_l\rangle \end{cases} \quad \text{avec } l \neq m \tag{65}$$

où $d\alpha$ est un nombre infinitésimal réel et χ un nombre réel arbitraire et fixe. Quel que soit χ , on vérifie alors que la variation de $\langle \theta_l | \theta_l \rangle$ est bien nulle (elle contient les produits scalaires $\langle \theta_l | \theta_m \rangle$ ou $\langle \theta_m | \theta_l \rangle$ qui sont nuls), ainsi que celle symétrique de $\langle \theta_m | \theta_m \rangle$, et enfin que :

$$d \langle \theta_l | \theta_m \rangle = d\alpha e^{-i\chi} \langle \theta_m | \theta_m \rangle - d\alpha e^{-i\chi} \langle \theta_l | \theta_l \rangle = 0 \tag{66}$$

Les variations (65) sont donc acceptables, quel que soit χ réel.

Nous pouvons calculer ce qu'elles entraînent pour l'opérateur $\tilde{\rho}_1(1)$ défini en (40). Dans la somme sur k , seuls varient les termes $k = l$ et $k = m$. Le terme $k = l$ produit une variation :

$$d\alpha f_\beta(\tilde{\epsilon}_l - \mu) [e^{i\chi} |\theta_m\rangle \langle \theta_l| + e^{-i\chi} |\theta_l\rangle \langle \theta_m|] \tag{67}$$

alors que le terme $k = m$ produit une variation semblable, où la fonction de distribution $f_\beta(\tilde{\epsilon}_l - \mu)$ est remplacée par $-f_\beta(\tilde{\epsilon}_m - \mu)$. Donc :

$$d\tilde{\rho}_1(1) = d\alpha [f_\beta(\tilde{\epsilon}_l - \mu) - f_\beta(\tilde{\epsilon}_m - \mu)] [e^{i\chi} |\theta_m\rangle \langle \theta_l| + e^{-i\chi} |\theta_l\rangle \langle \theta_m|] \tag{68}$$

Il nous faut maintenant reporter ces variations dans les trois termes de (61) ; les distributions f ne changent pas, de sorte que seuls les termes $\tilde{\Phi}_1$ et $\tilde{\Phi}_2$ sont affectés. La variation infinitésimale de $\tilde{\Phi}_1$ s'écrit :

$$d\tilde{\Phi}_1 = \text{Tr}_1 \{ [K_0 + V_1] d\tilde{\rho}_1(1) \} \quad (69)$$

Pour $d\tilde{\Phi}_2$, il contient deux contributions, celle due à $d\tilde{\rho}_1(1)$ et celle due à $d\tilde{\rho}_1(2)$. Mais ces deux contributions sont égales, puisque l'opérateur $W_2(1, 2)$ est symétrique ; les deux particules 1 et 2 jouent un rôle équivalent. Le facteur 1/2 de $\tilde{\Phi}_2$ disparaît donc, et l'on obtient :

$$d\tilde{\Phi}_2 = \text{Tr}_{1,2} \left\{ d\tilde{\rho}_1(1) \otimes \tilde{\rho}_1(2) [W_2(1, 2)] [1 + \eta P_{\text{ex}}(1, 2)] \right\} \quad (70)$$

Nous pouvons regrouper ces deux contributions en utilisant le fait que, pour un opérateur $O(1, 2)$ quelconque, nous pouvons écrire :

$$\text{Tr}_{1,2} \{ d\tilde{\rho}_1(1) O(1, 2) \} = \text{Tr}_1 \left\{ d\tilde{\rho}_1(1) \text{Tr}_2 \{ O(1, 2) \} \right\} \quad (71)$$

Il suffit pour établir cette égalité⁵ de reporter la définition de la trace partielle $\text{Tr}_2 \{ O(1, 2) \}$ de l'opérateur $O(1, 2)$ par rapport à la particule 2. Donc ici :

$$\begin{aligned} d\tilde{\Phi} &= d\tilde{\Phi}_1 + d\tilde{\Phi}_2 \\ &= \text{Tr}_1 \left\{ d\tilde{\rho}_1(1) \left[K_0 + V_1 + \text{Tr}_2 \{ \tilde{\rho}_1(2) W_2(1, 2) [1 + \eta P_{\text{ex}}(1, 2)] \} \right] \right\} \end{aligned} \quad (72)$$

Insérons maintenant l'expression (68) de $d\tilde{\rho}_1(1)$. Se présentent deux termes, l'un proportionnel à $e^{i\chi}$, l'autre à $e^{-i\chi}$; le second vaut :

$$\begin{aligned} d\alpha e^{-i\chi} & [f_\beta(\tilde{e}_l - \mu) - f_\beta(\tilde{e}_m - \mu)] \\ & \times \text{Tr}_1 \left\{ |\theta_l\rangle \langle \theta_m| \left[K_0 + V_1 + \text{Tr}_2 \{ \tilde{\rho}_1(2) W_2(1, 2) [1 + \eta P_{\text{ex}}(1, 2)] \} \right] \right\} \end{aligned} \quad (73)$$

Mais, pour un opérateur $O(1)$ quelconque :

$$\begin{aligned} \text{Tr}_1 \{ |\theta_l\rangle \langle \theta_m| O(1) \} &= \sum_i \langle \theta_i | \theta_l \rangle \langle \theta_m | O(1) | \theta_i \rangle = \sum_i \langle \theta_m | O(1) | \theta_i \rangle \langle \theta_i | \theta_l \rangle \\ &= \langle \theta_m | O(1) | \theta_l \rangle \end{aligned} \quad (74)$$

de sorte que la variation (73) peut s'écrire :

$$\begin{aligned} d\alpha e^{-i\chi} & [f_\beta(\tilde{e}_l - \mu) - f_\beta(\tilde{e}_m - \mu)] \\ & \langle \theta_m | \left[K_0 + V_1 + \text{Tr}_2 \{ \tilde{\rho}_1(2) W_2(1, 2) [1 + \eta P_{\text{ex}}(1, 2)] \} \right] | \theta_l \rangle \end{aligned} \quad (75)$$

5. La définition des traces partielles est donnée dans le § 5.b du Complément E_{III}. Le membre de gauche de (71) s'écrit $\sum_{i,j} \langle 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j | d\rho_I(1) O(1, 2) | 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j \rangle$. On injecte alors après $d\rho_I(1)$ une relation de fermeture sur les kets $|1 : \theta_k ; 2 : \theta_{k'}\rangle$, avec $k' = j$ puisque l'opérateur $d\rho_I(1)$ n'agit pas sur la particule 2. Il vient $\sum_{i,k} \langle 1 : \theta_i | d\rho_I(1) | 1 : \theta_k \rangle \sum_j \langle 1 : \theta_k ; 2 : \theta_j | O(1, 2) | 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j \rangle$, où la somme sur j est la définition de l'élément de matrice de la trace partielle sur 2 de $O(1, 2)$ entre $\langle 1 : \theta_k |$ et $| 1 : \theta_i \rangle$. On obtient alors le second membre de (71).

Le terme en $e^{i\chi}$ a une forme semblable, que nous n'avons pas besoin de calculer. En effet, la variation $d\tilde{\Phi}$ est une somme d'un terme en $e^{i\chi}$ et d'un autre en $e^{-i\chi}$:

$$d\tilde{\Phi} = d\alpha [c_1 e^{-i\chi} + c_2 e^{i\chi}] \quad (76)$$

et la condition de stationnarité impose que $d\tilde{\Phi}$ s'annule, quel que soit le choix arbitraire de χ . Si nous choisissons $\chi = 0$, nous obtenons $c_1 + c_2 = 0$; si nous choisissons $\chi = \pi/2$, et si nous multiplions par $-i$, nous obtenons $c_1 - c_2 = 0$. Par somme et différence, on constate alors que les deux coefficients c_1 et c_2 sont nuls. Nous pouvons donc imposer séparément la nullité des termes en $e^{\pm i\chi}$, et donc de l'expression (75). Si $\tilde{e}_l \neq \tilde{e}_m$, les fonctions de distribution f_β ne sont pas égales, et nous obtenons donc :

$$\langle \theta_m | [K_0 + V_1 + \text{Tr}_2 \{ \tilde{\rho}_1(2) W_2(1, 2) [1 + \eta P_{\text{ex}}(1, 2)] \}] | \theta_l \rangle = 0 \quad (77)$$

(si $\tilde{e}_l = \tilde{e}_m$, en revanche, nous n'obtenons pour le moment aucune condition particulière à satisfaire⁶).

β . Variation des énergies

Examinons maintenant les conséquences d'un changement $d\tilde{e}_l$ de l'énergie \tilde{e}_l . La fonction $f_\beta(\tilde{e}_l - \mu)$ acquiert une variation df_β^l qui, selon la relation (40), induit une variation de $\tilde{\rho}_1$:

$$d\tilde{\rho}_1 = |\theta_l\rangle \langle \theta_l| df_\beta^l \quad (78)$$

et entraîne à son tour des variations des expressions (61) de $\tilde{\Phi}_1$ et $\tilde{\Phi}_2$. Leur somme est :

$$d\tilde{\Phi}_1 + d\tilde{\Phi}_2 = \text{Tr}_1 \left\{ d\tilde{\rho}_1(1) \left[K_0 + V_1 + \text{Tr}_2 \{ \tilde{\rho}_1(2) [W_2(1, 2)] [1 + \eta P_{\text{ex}}(1, 2)] \} \right] \right\} \quad (79)$$

où le facteur 1/2 de $\tilde{\Phi}_2$ a disparu car les variations induites par $\tilde{\rho}_1(1)$ et $\tilde{\rho}_1(2)$ se doublent. Si nous reportons (78) dans cette égalité et utilisons à nouveau (74), nous obtenons :

$$d\tilde{\Phi}_1 + d\tilde{\Phi}_2 = df_\beta^l \langle \theta_l | \left[K_0 + V_1 + \text{Tr}_2 \{ \tilde{\rho}_1(2) [W_2(1, 2)] [1 + \eta P_{\text{ex}}(1, 2)] \} \right] | \theta_l \rangle \quad (80)$$

Pour $\tilde{\Phi}_3$, la variation est la somme d'un terme en $d\tilde{e}_l$ provenant de la présence explicite des énergies \tilde{e}_i dans sa définition (61), et d'un terme en df_β^l . Si l'on fait varier uniquement l'énergie \tilde{e}_l (sans tenir compte des variations de la fonction de distribution), on obtient un résultat qui s'annule, car :

$$\begin{aligned} \left[-f_\beta(\tilde{e}_l - \mu) + \eta k_B T [(-\eta)(-\beta) e^{-\beta(\tilde{e}_l - \mu)}] \frac{1}{1 - \eta e^{-\beta(\tilde{e}_l - \mu)}} \right] d\tilde{e}_l \\ = \left[-f_\beta(\tilde{e}_l - \mu) + f_\beta(\tilde{e}_l - \mu) \right] d\tilde{e}_l = 0 \end{aligned} \quad (81)$$

Il suffit donc de faire varier de df_β^l la fonction de distribution, et l'on obtient simplement :

$$d\tilde{\Phi}_3 = -\tilde{e}_l df_\beta^l \quad (82)$$

6. C'est normal puisque ce choix n'induit aucune variation de l'opérateur densité d'essai.

Pour finir, après simplification par df_β^l (qui par hypothèse n'est pas nul), l'annulation de la variation $d\tilde{\Phi}$ conduit à la condition :

$$\begin{aligned} d\tilde{\Phi}_1 + d\tilde{\Phi}_2 + d\tilde{\Phi}_3 \\ = \langle \theta_l | [K_0 + V_1 - \tilde{e}_l + \text{Tr}_2 \{ \tilde{\rho}_1(2) [W_2(1,2)] [1 + \eta P_{\text{ex}}(1,2)] \}] | \theta_l \rangle = 0 \end{aligned} \quad (83)$$

Elle ressemble à la condition de stationnarité à énergies constantes (77), mais ici les indices l et m sont confondus ; de plus, il existe un terme en $-\tilde{e}_l$ dans l'opérateur.

3. Equations de champ moyen dépendant de la température

Nous allons voir comment l'introduction d'un opérateur de Hartree-Fock, agissant dans l'espace des états d'une seule particule, permet d'écrire les relations de stationnarité que nous venons d'obtenir sous une forme concise et d'usage plus aisé.

3-a. Forme des équations

Définissons un opérateur de Hartree-Fock dépendant de la température comme la trace partielle qui apparaît dans les équations précédentes :

$$W_{HF}(\beta) = \text{Tr}_2 \{ \tilde{\rho}_1(2) W_2(1,2) [1 + \eta P_{\text{ex}}(1,2)] \} \quad (84)$$

C'est donc un opérateur agissant sur la seule particule 1. Il est équivalent de le définir par ses éléments de matrice entre états individuels :

$$\begin{aligned} \langle \theta_k | W_{HF}(\beta) | \theta_l \rangle \\ = \sum_j f_\beta(\tilde{e}_j - \mu) \langle 1 : \theta_k ; 2 : \theta_j | W_2(1,2) [1 + \eta P_{\text{ex}}(1,2)] | 1 : \theta_l ; 2 : \theta_j \rangle \end{aligned} \quad (85)$$

L'équation (77) s'applique quel que soit le couple de valeurs choisies pour l et m , pourvu que $\tilde{e}_l \neq \tilde{e}_m$. Lorsque l est fixé et que m varie, elle exprime simplement que le ket :

$$[K_0 + V_1 + W_{HF}(\beta)] | \theta_l \rangle \quad (86)$$

est orthogonal à tous les vecteurs propres $|\theta_m\rangle$ de valeur propre \tilde{e}_m différente de \tilde{e}_l ; il a donc une composante nulle sur ces vecteurs. Quant à l'équation (83), elle donne la composante de ce ket sur $|\theta_l\rangle$, qui est égale à $\tilde{e}_l |\theta_l\rangle$. L'ensemble des $|\theta_m\rangle$ (y compris ceux de même valeur propre que $|\theta_l\rangle$) constitue une base de l'espace des états individuels, définie en (26) comme la base des vecteurs propres de l'opérateur individuel \tilde{h} . Deux cas sont alors possibles :

(i) Si \tilde{e}_l est une valeur propre non dégénérée de \tilde{h} , l'ensemble des équations (77) et (83) détermine toutes les composantes du ket $[K_0 + V_1 + W_{HF}(\beta)] | \theta_l \rangle$. Il indique que $|\theta_l\rangle$ est vecteur propre de l'opérateur $K_0 + V_1 + W_{HF}$ avec la valeur propre \tilde{e}_l .

(ii) Si cette valeur propre de \tilde{h} est dégénérée, la relation (77) permet seulement d'affirmer que le sous-espace propre de \tilde{h} de valeur propre \tilde{e}_l est stable sous l'action de l'opérateur $K_0 + V_1 + W_{HF}$; elle ne donne pas d'information sur les composantes du ket (86) à l'intérieur de ce sous-espace. On peut cependant diagonaliser $K_0 +$

$V_1 + W_{HF}$ dans chacun des sous-espaces propres de \tilde{h} , ce qui conduit à une nouvelle base de vecteurs propres $|\varphi_n\rangle$ qui sont maintenant communs à \tilde{h} et $K_0 + V_1 + W_{HF}$.

On raisonne alors dans cette base où tous les $[K_0 + V_1 + W_{HF}(\beta)]|\varphi_n\rangle$ sont proportionnels à $|\varphi_n\rangle$. Compte tenu de (83), on obtient :

$$\boxed{[K_0 + V_1 + W_{HF}(\beta)]|\varphi_n\rangle = \tilde{e}_n |\varphi_n\rangle} \quad (87)$$

Comme nous venons de le voir, le changement de base des $|\theta_l\rangle$ vers les $|\varphi_n\rangle$ se produit uniquement à l'intérieur des sous-espaces propres de \tilde{h} de valeur propre \tilde{e} donnée ; on peut donc remplacer les $|\theta_l\rangle$ par les $|\varphi_n\rangle$ dans la définition (40) de $\tilde{\rho}_1(1)$ et écrire :

$$\boxed{\tilde{\rho}_1(1) = \sum_n f_\beta(\tilde{e}_n - \mu) |1 : \varphi_n\rangle \langle 1 : \varphi_n|} \quad (88)$$

Le report de cette relation dans la définition (84) de $W_{HF}(\beta)$ conduit à un système d'équations ne concernant plus que les vecteurs propres $|\varphi_n\rangle$.

L'ensemble des équations (87) pour toutes les valeurs de n , associé à (84) et (88) pour définir le potentiel $W_{HF}(\beta)$ en fonction des $|\varphi_n\rangle$, constitue les équations de Hartree-Fock dépendant de la température.

3-b. Propriétés et limites des équations

Nous discutons maintenant l'application des équations de champ moyen que nous avons obtenues et leurs limites de validité, qui sont plus strictes pour les bosons que pour les fermions.

α. Utilisation des équations

Les équations de Hartree-Fock sont celles d'un système autocohérent et non linéaire : les vecteurs propres $|\varphi_n\rangle$ et les énergies propres de l'opérateur densité $\tilde{\rho}_1(1)$ sont solutions d'une équation aux valeurs propres (87) qui dépend elle-même de $\tilde{\rho}_1(1)$. La situation rappelle donc celle que nous avons rencontrée avec les équations de Hartree-Fock à température nulle et, a priori, il n'est pas possible de leur trouver des solutions exactes.

Comme à température nulle, on peut procéder par itération : on part d'un opérateur densité $\tilde{\rho}_1(1)$ qui paraît plausible pour des raisons physiques, et on l'insère ensuite dans (84) pour calculer une première valeur de l'opérateur potentiel de Hartree-Fock. On diagonalise ensuite cet opérateur afin d'obtenir ses kets propres et valeurs propres \tilde{e}_n . On construit alors l'opérateur $\bar{\rho}_1$ qui admet les mêmes kets propres, mais dont les valeurs propres sont les $f_\beta(\tilde{e}_n - \mu)$. Insérant ce nouvel opérateur $\bar{\rho}_1$ dans (84), on obtient une deuxième itération de l'opérateur de Hartree-Fock. On diagonalise alors à nouveau cet opérateur pour calculer de nouvelles valeurs propres et nouveaux vecteurs propres, ce qui permet de construire l'approximation suivante $\bar{\bar{\rho}}_1$ de $\tilde{\rho}_1$, et ainsi de suite. Au bout de quelques itérations, on peut espérer la convergence vers une solution autocohérente.

β. Limite de validité

Pour un système de fermions, aucune limite de principe générale n'existe à l'utilisation de l'approximation de Hartree-Fock. Bien évidemment, la qualité du

résultat final dépend de la mesure dans laquelle un traitement en champ moyen des interactions est une bonne approximation, donc de la nature des interactions. On comprend bien intuitivement que, plus la portée des interactions est grande, plus chaque particule est soumise à l'action d'un grand nombre d'autres, et plus un effet de moyennage se produit qui améliore l'approximation du champ moyen. En revanche, si chaque particule n'interagit qu'avec une seule partenaire, de fortes corrélations binaires peuvent apparaître, qui ne peuvent être traitées correctement par un champ moyen agissant sur des particules indépendantes.

Pour les bosons, les mêmes remarques générales s'appliquent, mais de plus les populations ne sont plus limitées à l'unité. Lorsque par exemple se produit la condensation de Bose-Einstein, une population devient beaucoup plus grande que les autres, et donc singulière, situation qui n'est pas prise en compte dans les calculs ci-dessus. L'approximation de Hartree-Fock est donc soumise à des limites plus strictes que pour des fermions, limites que nous discutons maintenant.

Pour un système de bosons où de nombreux états individuels ont des populations comparables, le traitement des interactions par un champ moyen de Hartree-Fock conduit à une aussi bonne approximation que pour les fermions. Mais, si le système est proche de la condensation, ou même condensé, les équations de champ moyen que nous avons écrites ne sont en fait plus valables. La raison en est que l'opérateur densité d'essai de la relation (31) contient une fonction de distribution associée à chaque état quantique individuel qui varie comme pour un gaz parfait, donc selon une simple exponentielle décroissante du nombre d'occupation. Mais nous avons vu au § 3-b- β du Complément B_{XV} qu'un gaz parfait présente des fluctuations du nombre de particules dans chacun des états individuels qui sont aussi grandes que la valeur moyenne de ce nombre de particules; si l'état individuel est très peuplé, ce sont donc des fluctuations extrêmement importantes. Or ceci est physiquement impossible en présence d'interactions répulsives : toute fluctuation de population augmente la valeur moyenne des carrés du nombre d'occupation (somme du carré de la valeur moyenne et du carré de la fluctuation), donc l'énergie d'interaction (proportionnelle à la valeur moyenne du carré). Une forte fluctuation des populations entraînerait immédiatement une importante augmentation de l'énergie d'interaction répulsive, en contradiction avec la minimisation du potentiel thermodynamique. De façon équivalente, on peut dire que la compressibilité finie du système physique introduite par les interactions s'oppose à toute fluctuation trop élevée de la densité. Il en découle que les fluctuations du nombre de particules condensées prévues par l'opérateur densité d'essai de Hartree-Fock ne peuvent être physiques en cas de condensation.

Il est intéressant d'analyser plus précisément l'origine de cette limite de l'approximation de Hartree-Fock en termes de corrélations entre particules. Dans la relation (51), l'opérateur à deux particules \hat{G} est quelconque. Cette relation indique donc que, avec l'opérateur densité d'essai (31), l'opérateur densité réduit à deux particules s'écrit :

$$\tilde{\rho}_2(1, 2) = \tilde{\rho}_1(1) \otimes \tilde{\rho}_1(1) [1 + P_{ex}(1, 2)] \quad (89)$$

Ses éléments de matrice diagonaux sont donc :

$$\begin{aligned} & \langle 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j | \tilde{\rho}_2(1, 2) | 1 : \theta_i ; 2 : \theta_j \rangle \\ &= \langle 1 : \theta_i | \tilde{\rho}_1 | 1 : \theta_i \rangle \langle 2 : \theta_j | \tilde{\rho}_1 | 2 : \theta_j \rangle + \langle 1 : \theta_i | \tilde{\rho}_1 | 1 : \theta_j \rangle \langle 2 : \theta_j | \tilde{\rho}_1 | 2 : \theta_i \rangle \end{aligned} \quad (90)$$

c'est-à-dire la somme d'un terme direct et d'un terme d'échange. Lorsque $i \neq j$, la présence d'un terme d'échange n'est pas surprenante ; elle correspond bien à l'analyse générale du § C-5 du Chapitre XV. Elle est également du même type que l'expression de la fonction de corrélation spatiale écrite en (C.34) de ce chapitre, qui est bien la somme de deux contributions, une directe (C.32) et une d'échange (C.33) ; comme cette dernière est positive lorsque $r_1 \simeq r_2$, l'échange se traduit physiquement par un groupement spatial des bosons. Mais, lorsque $i = j$, il est surprenant que le terme d'échange semble subsister dans (90), alors que la notion même d'échange perd son sens : lorsqu'un seul état individuel est mis en jeu, les quatre expressions (C.21) du chapitre XV se réduisent à une seule, le terme direct. On vérifie d'ailleurs que le terme d'échange (C-34) du Chapitre XV contient la condition explicite $i \neq j$, ce qui signifie bien qu'il ne reçoit aucune contribution de $i = j$. De plus, nous confirmerons au § 3 du Complément A_{XVI} que des bosons placés tous dans le même état quantique individuel ne sont pas corrélés spatialement, et ne présentent donc ni groupement ni effet d'échange. L'expression mathématique de l'opérateur densité d'essai de Hartree-Fock à deux particules contient donc trop de termes d'échange. Ceci est sans conséquence tant que le système de bosons reste loin de la condensation de Bose-Einstein : l'erreur introduite est faible puisque les termes $i = j$ jouent alors un rôle négligeable devant les termes $i \neq j$ dans les sommes sur i et j qui apparaissent dans l'énergie d'interaction. Mais, dès qu'un niveau individuel devient très peuplé, des erreurs significatives peuvent être introduites et l'approximation de Hartree-Fock doit être abandonnée. Il existe cependant des traitements théoriques plus élaborés qui sont mieux adaptés à ce cas.

3-c. Différences avec les équations de Hartree-Fock à température nulle (fermions)

La différence principale entre l'approche que nous avons utilisée et celle des Compléments C_{XV} et E_{XV} est qu'ils se limitaient à la recherche d'un seul état propre de l'hamiltonien \hat{H} , généralement l'état fondamental ; si l'on s'intéresse à plusieurs de ces états, il faut reprendre le calcul séparément pour chacun d'entre eux. Pour obtenir les propriétés de l'équilibre thermique, on pourrait alors envisager de recommencer le calcul un très grand nombre de fois, puis de pondérer les résultats par des probabilités d'occupation. Mais il est clair que cette méthode serait très lourde, voire impossible pour un système macroscopique dont les niveaux sont extrêmement nombreux. Dans le présent complément, les équations de Hartree-Fock fournissent d'emblée les moyennes thermiques, ainsi que les vecteurs propres d'un opérateur densité à une particule avec leurs énergies.

Une autre différence importante est l'apparition d'un opérateur de Hartree-Fock qui dépend de la température, dépendance qui provient de la présence dans (85) d'une fonction de distribution qui varie avec la température – ou, ce qui est équivalent, de la présence dans (84) d'un opérateur dépendant de β qui remplace le projecteur $P_N(2)$ sur tous les états individuels peuplés. Les équations obtenues rappellent donc celles de particules indépendantes, chacune trouvant son équilibre thermodynamique en se déplaçant dans le potentiel moyen autocohérent créé par toutes les autres, y compris la contribution d'échange (qu'on peut ignorer dans une version simplifiée, dite de Hartree).

Il faut cependant garder à l'esprit que le potentiel de Hartree-Fock associé à chaque état individuel dépend maintenant des populations d'une infinité d'autres

états individuels, populations qui sont fonctions de leur énergie et de la température. En d'autres termes, du fait du caractère non linéaire des équations de Hartree-Fock, le calcul ne se ramène donc pas à une simple juxtaposition de calculs séparés pour les états stationnaires individuels placés en champ moyen.

3-d. Limite de température nulle (fermions)

Vérifions maintenant que la méthode de Hartree-Fock à température non nulle redonne bien les mêmes résultats que la méthode à température nulle introduite au Complément E_{XV} pour des fermions.

Nous avons introduit au § 2-d du Complément B_{XV} la notion de gaz quantique dégénéré pour un gaz parfait. Elle se généralise à un gaz en interaction : dans un système de fermions, si $\beta\mu \gg 1$, on dit que le système est fortement dégénéré. Ainsi, lorsque la température tend vers zéro, un système de fermions devient nécessairement de plus en plus dégénéré. Pouvons-nous alors vérifier que les résultats de ce complément redonnent ceux du Complément E_{XV}, valables à température nulle ?

Nous avons vu que la température intervient dans la définition (85) du potentiel moyen de Hartree-Fock W_{HF} . A la limite d'une très forte dégénérescence, la fonction de distribution de Fermi-Dirac qui apparaît dans la définition (40) de $\tilde{\rho}_1(1)$ devient pratiquement une fonction palier : une fonction égale à 1 si l'énergie e_j est inférieure au potentiel chimique μ , nulle sinon (Figure 1 du Complément B_{XV}). En d'autres termes, seuls sont peuplés (et par un seul fermion) les états d'énergie inférieure à μ , donc au niveau de Fermi. Dans ces conditions, le $\tilde{\rho}_1(2)$ de (84) devient pratiquement égal au projecteur $P_N(2)$ qui, au Complément E_{XV}, apparaît dans la définition (58) du potentiel de Hartree-Fock à température nulle ; en d'autres termes, la trace partielle contenue dans cette relation (85) est alors strictement limitée aux états individuels d'énergies les plus basses. On arrive ainsi aux mêmes équations de Hartree-Fock qu'à température nulle, et donc à la détermination d'une série d'états propres individuels permettant de construire un unique état à N particules.

3-e. Equations pour les fonctions d'onde

Ecrivons maintenant les équations de Hartree-Fock (87) en termes de fonctions d'onde ; ces équations sont strictement équivalentes à (87), qui est écrite en termes d'opérateurs et de kets, mais leur forme est parfois plus commode à utiliser, en particulier pour les calculs numériques.

Nous supposons que les particules ont un spin. La prise en compte explicite de ce spin conduit à noter les fonctions d'onde $\varphi^\nu(\mathbf{r})$, avec :

$$\varphi^\nu(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \nu | \varphi \rangle \quad (91)$$

où le nombre quantique de spin ν peut prendre $(2S + 1)$ valeurs ; selon la nature des particules considérées, les spins S possibles sont $S = 0$, $S = 1/2$, $S = 1$, etc. Comme dans le Complément E_{XV} (§ 2-d), nous introduisons une base complète $\{|\varphi_k^\nu\rangle\}$ de l'espace des états individuels, formée de kets qui sont tous vecteurs propres de la composante du spin sur l'axe de quantification avec la valeur propre ν_k . Pour chaque valeur de n , l'indice de spin ν ne prend alors qu'une seule valeur ν_n ; ce n'est donc pas un indice indépendant. En ce qui concerne les potentiels, nous supposons à nouveau que V_1 est diagonal en ν , mais que ses éléments diagonaux $V_1^\nu(\mathbf{r})$ peuvent dépendre

de ν . En revanche, le potentiel d'interaction est décrit par une fonction $W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ qui ne dépend que de $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, mais n'agit pas sur les spins.

Pour obtenir les éléments de matrice de $\widehat{W}_{HF}(\beta)$ en représentation $\{|\mathbf{r}, \nu\rangle\}$, utilisons (85) après y avoir remplacé les $|\theta\rangle$ par les $|\varphi\rangle$; nous avons vu au § 3 que c'était possible. Nous multiplions les deux membres par $\langle \mathbf{r}, \nu | \varphi_k^{\nu k} \rangle$ et $\langle \varphi_l^{\nu l} | \mathbf{r}', \nu' \rangle$ et sommons sur les indices k et l ; dans chacun des membres apparaissent les relations de fermeture :

$$\sum_k \langle \mathbf{r}, \nu | \varphi_k^{\nu k} \rangle \langle \varphi_k^{\nu k} | = \langle \mathbf{r}, \nu | \quad \text{et} \quad \sum_l |\varphi_l^{\nu l}\rangle \langle \varphi_l^{\nu l} | \mathbf{r}', \nu' \rangle = |\mathbf{r}', \nu' \rangle \quad (92)$$

Il vient alors :

$$\langle \mathbf{r}, \nu | \widehat{W}_{HF}(\beta) | \mathbf{r}', \nu' \rangle = \sum_j f_\beta(\tilde{e}_j - \mu) \langle 1 : \mathbf{r}, \nu; 2 : \varphi_j^{\nu j} | W_2(1, 2) [1 + \eta P_{ex}(1, 2)] | 1 : \mathbf{r}', \nu'; 2 : \varphi_j^{\nu j} \rangle \quad (93)$$

Comme dans le § C-5 du Chapitre XV, nous obtenons ainsi la somme d'un terme direct (terme en 1 dans le crochet central) et d'un terme d'échange (terme contenant ηP_{ex}). Cette expression contient le même élément de matrice que l'expression (87) du Complément E_{XV}, la seule différence étant le présence d'un coefficient $f_\beta(\tilde{e}_j - \mu)$ dans chaque terme de la somme (ainsi que le fait que la somme est ici infinie).

(i) Pour le terme direct, comme dans ce complément, nous insérons une relation de fermeture sur la position de la particule 2 :

$$|2 : \varphi_j^{\nu j} \rangle = \int d^3 r_2 \varphi_j^{\nu j}(\mathbf{r}_2) |2 : \mathbf{r}_2, \nu_j \rangle \quad (94)$$

Puisque l'opérateur d'interaction est diagonal en représentation positions, la partie de l'élément de matrice de (93) qui ne contient pas l'opérateur d'échange devient alors :

$$\int d^3 r_2 |\varphi_j^{\nu j}(\mathbf{r}_2)|^2 \langle 1 : \mathbf{r}, \nu; 2 : \mathbf{r}_2 | W_2(1, 2) | 1 : \mathbf{r}', \nu'; 2 : \mathbf{r}_2 \rangle \quad (95)$$

Le terme direct de (93) s'écrit donc :

$$\delta_{\nu\nu'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \int d^3 r_2 W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2) \sum_j f_\beta(\tilde{e}_j - \mu) |\varphi_j^{\nu j}(\mathbf{r}_2)|^2 \quad (96)$$

qui est l'équivalent de la relation (91) du Complément E_{XV}.

(ii) Le terme d'échange est obtenu par permutation des deux particules dans le ket qui figure à droite dans le second membre de (93); le caractère diagonal de $W_2(1, 2)$ en représentation position fait alors apparaître l'expression :

$$\langle 1 : \mathbf{r}, \nu | 1 : \varphi_j^{\nu j} \rangle \langle 2 : \varphi_j^{\nu j} | 2 : \mathbf{r}', \nu' \rangle W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (97)$$

Pour que le premier produit scalaire soit non nul, il faut que l'indice j soit tel que $\nu_j = \nu$; de même, pour que le second produit scalaire soit non nul, il faut que

$\nu_j = \nu'$. La conjonction des deux conditions n'est possible que si $\nu = \nu'$, et le terme d'échange de (93) vaut donc :

$$\eta \delta_{\nu\nu'} \sum_{\nu_j=\nu} f_\beta(\tilde{\epsilon}_j - \mu) [\varphi_j^{\nu_j}(\mathbf{r})] [\varphi_j^{\nu_j}(\mathbf{r}')]^* W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (98)$$

où la somme porte sur toutes les valeurs de j telles que $\nu_j = \nu$: ce terme n'existe que si les deux particules en interaction sont totalement indiscernables, ce qui implique qu'elles soient dans un même état de spin (cf. la discussion du Complément E_{XV}).

Définissons alors les potentiels direct et d'échange par :

$$\begin{aligned} V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) &= \int d^3r'' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \sum_j f_\beta(\tilde{\epsilon}_j - \mu) |\varphi_j^{\nu_j}(\mathbf{r}'')|^2 \\ V_{\text{ex}}^\nu(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{\nu_j=\nu} f_\beta(\tilde{\epsilon}_j - \mu) [\varphi_j^{\nu_j}(\mathbf{r})] [\varphi_j^{\nu_j}(\mathbf{r}')]^* \end{aligned} \quad (99)$$

Les égalités (87) conduisent alors aux équations de Hartree-Fock en représentation position :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_1^{\nu_n}(\mathbf{r}) + V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) \right] \varphi_n^{\nu_n}(\mathbf{r}) + \eta \int d^3r' V_{\text{ex}}^{\nu_n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_n^{\nu_n}(\mathbf{r}') = \tilde{\epsilon}_n \varphi_n^{\nu_n}(\mathbf{r}) \quad (100)$$

La discussion générale du § 3-b s'applique ici sans changement. Ces équations sont à la fois non linéaires et autocohérentes. En effet, les potentiels direct et d'échange sont eux-mêmes fonction des solutions $\varphi_j^{\nu_j}(\mathbf{r})$ des équations aux valeurs propres (100). De ce point de vue, la situation est donc la même qu'à température nulle, et l'on peut également avoir recours aux méthodes itératives pour rechercher des solutions. Ici, cependant, les équations à résoudre ne sont pas en nombre fini N , mais en nombre infini, comme nous l'avons déjà souligné au § 3-c. L'ensemble des solutions doit en effet permettre de sous-tendre l'espace des états individuels. De même, dans les définitions (99) des potentiels direct et d'échange, les sommations sur j ne sont pas restreintes à N états, mais infinies. Cependant, si le nombre de ces fonctions d'onde est en principe infini, en pratique (pour les calculs numériques) on prendra un nombre élevé mais fini. Quant aux conditions initiales pour débiter l'itération, on pourra par exemple choisir les états et les énergies d'un gaz de fermions libres, mais toute autre conjecture initiale est également possible.

Conclusion

Les applications des calculs précédents et, plus généralement, de la théorie du champ moyen sont très nombreuses. Nous en donnerons quelques exemples dans le complément suivant, mais ils sont loin de donner une image de la richesse des applications possibles. L'idée physique générale est, chaque fois que c'est possible, de ramener le calcul des différentes grandeurs physiques à un calcul similaire à celui d'un gaz parfait où les particules ont des dynamiques indépendantes. Effectivement, nous avons vu que les populations des niveaux individuels, ainsi que le nombre total de particules, sont donnés par les mêmes fonctions de distribution f_β que pour un

gaz parfait – cf. relations (38) et (44). Il en est de même pour l'entropie S du système, comme nous l'avons remarqué à la fin du § 2-b- α . A condition de remplacer les énergies des particules libres par les énergies modifiées $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k},\nu}$, l'analogie avec des particules indépendantes est donc très réelle.

Cependant, si l'on désire calculer d'autres grandeurs thermodynamiques, par exemple l'énergie moyenne, on ne peut plus utiliser les formules du gaz parfait ; il faut revenir aux équations du § 2-c. Le grand potentiel peut être obtenu en reportant dans (61) les $|\theta_i\rangle$ et les $\tilde{\epsilon}_i$ obtenus à partir des équations de Hartree-Fock. Une autre méthode utilise le fait que $\langle \hat{N} \rangle$ est connu à partir des formules du gaz parfait contenant la distribution f_β , et donc ne demande pas de calculs supplémentaires. Comme :

$$\langle \hat{N} \rangle = \beta^{-1} \frac{\partial}{\partial \mu} \text{Log} Z \quad (101)$$

on peut intégrer $\langle \hat{N} \rangle$ sur μ (entre $-\infty$ et la valeur courante μ , à β constant) pour obtenir $\text{Log} Z$, donc le grand potentiel. A partir du grand potentiel, toutes les autres grandeurs thermodynamiques peuvent être calculées par des dérivations appropriées (une dérivation par rapport à β pour obtenir l'énergie moyenne, par exemple). Nous verrons un exemple d'application de cette méthode au § 4-a du complément suivant.

Il faut toutefois garder à l'esprit que ces calculs découlent de l'approximation du champ moyen, donc du fait que l'opérateur densité exact à l'équilibre a été remplacé par un opérateur de la forme (32). Certes, nombreux sont les cas où cette approximation est bonne, voire excellente ; c'est en particulier le cas si le potentiel d'interaction entre particules est à longue portée, ce qui rend plus efficace l'effet de moyenne sur plusieurs partenaires du potentiel d'interaction ressenti par chaque particule. Mais elle reste une approximation : si, par exemple, les particules interagissent via des potentiels en "cœur dur" (potentiel infini lorsque la distance mutuelle devient inférieure à une certaine distance microscopique), il est clair que dans la réalité elles ne peuvent jamais se trouver à une distance inférieure au diamètre de ce cœur dur ; or cette impossibilité n'est absolument pas prise en compte dans (32). Rien ne garantit donc a priori la qualité d'une approximation de champ moyen dans tous les cas, et il arrive effectivement qu'elle s'avère insuffisante.

Complément H_{XV}

Applications de la méthode du champ moyen à température non nulle (fermions et bosons)

1	Hartree-Fock à température non nulle, bref rappel . . .	153
2	Système homogène	154
2-a	Calcul des énergies	155
2-b	Quasi-particules	156
3	Magnétisme spontané de fermions répulsifs	157
3-a	Un modèle simple	157
3-b	Résolution des équations par itération graphique	159
3-c	Discussion physique	164
4	Bosons : équation d'état, instabilité attractive	165
4-a	Bosons répulsifs	167
4-b	Bosons attractifs	168

Dans le complément précédent, nous avons présenté la méthode de Hartree-Fock (champ moyen) à température non nulle, qui a de très nombreuses applications ; ce complément en discute quelques-unes. Nous commençons au § 1 par un bref rappel des résultats obtenus par cette méthode au complément précédent, qui nous seront utiles ici. Puis, au § 2, nous étudions les propriétés générales d'un système homogène ; c'est un cas particulier très fréquemment rencontré, ce qui lui confère une importance particulière. Les deux dernières parties mettent l'accent sur l'étude des transitions de phase dans des systèmes homogènes. Le § 3 concerne les fermions ; nous montrons comment la théorie du champ moyen permet de prévoir l'existence d'une transition où un système de fermions devient spontanément magnétique sous l'effet de la répulsion entre particules (pourtant supposée totalement indépendante des spins). Enfin, dans une dernière partie (§ 4), nous passons aux bosons et à l'étude de leur équation d'état. Ceci nous permettra en particulier de mettre en évidence une instabilité lorsque les bosons sont attractifs et proches de la condensation de Bose-Einstein.

1. Hartree-Fock à température non nulle, bref rappel

Commençons par un bref résumé des résultats déjà obtenus précédemment (§ 2 du Complément B_{XV} et § 3 du Complément G_{XV}) qui seront utilisés dans ce qui suit.

Pour un gaz parfait, la fonction de distribution f_{β}^{FD} pour des fermions, ou f_{β}^{BE} pour des bosons, est donnée par :

$$f_{\beta}(e - \mu) = \begin{cases} f_{\beta}^{FD}(e - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(e-\mu)} + 1} & \text{pour des fermions} \\ f_{\beta}^{BE}(e - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(e-\mu)} - 1} & \text{pour des bosons} \end{cases} \quad (1)$$

où $\beta = 1/k_B T$ et μ est le potentiel chimique. Le nombre total moyen $\langle \widehat{N} \rangle$ de particules est alors obtenu par une somme sur tous les états individuels accessibles repérés par l'indice i :

$$\langle \widehat{N} \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} f_{\beta}(e_i - \mu) \quad (2)$$

Les équations de Hartree-Fock dépendant de la température (équations du champ moyen) en représentation position sont fournies par la relation (100) du Complément G_{XV} :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_1^{\nu_n}(\mathbf{r}) + V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) \right] \varphi_n^{\nu_n}(\mathbf{r}) + \eta \int d^3 r' V_{\text{ex}}^{\nu_n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_n^{\nu_n}(\mathbf{r}') = \tilde{\epsilon}_n \varphi_n^{\nu_n}(\mathbf{r}) \quad (3)$$

où $\eta = +1$ pour des bosons, $\eta = -1$ pour des fermions, et où $V_{\text{dir}}(\mathbf{r})$ et $V_{\text{ex}}^{\nu}(\mathbf{r})$ sont donnés par la relation (99) du même complément (on suppose que le potentiel d'interaction n'agit pas sur les nombres quantiques de spin ν) :

$$\begin{aligned} V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) &= \int d^3 r'' W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \sum_j f_{\beta}(\tilde{\epsilon}_j - \mu) |\varphi_j^{\nu_j}(\mathbf{r}'')|^2 \\ V_{\text{ex}}^{\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{\nu_j=\nu} f_{\beta}(\tilde{\epsilon}_j - \mu) [\varphi_j^{\nu_j}(\mathbf{r})] [\varphi_j^{\nu_j}(\mathbf{r}')]^* \end{aligned} \quad (4)$$

2. Système homogène

Nous supposons à partir de maintenant que le système physique est soumis à des conditions aux limites créées par un potentiel à un corps confinant les particules dans une boîte cubique de côté L ; ce potentiel reste nul ($\widehat{V}_1 = 0$) à l'intérieur de la boîte, et prend une valeur infinie à l'extérieur. Pour rendre compte de ce confinement, nous utiliserons les conditions aux limites périodiques (Complément C_{XIV}, § 1.c), avec lesquelles les fonctions propres normalisées de l'énergie cinétique s'écrivent :

$$\frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (5)$$

où les vecteurs d'onde \mathbf{k} possibles sont tous ceux dont les trois composantes sont des multiples entiers de $2\pi/L$. Compte tenu de l'existence du spin, les états propres de l'énergie cinétique sont alors indicés par la valeur de \mathbf{k} et celle de ν , et s'écrivent $|\mathbf{k}, \nu\rangle$, avec :

$$\langle \mathbf{r}, \nu | \mathbf{k}, \nu \rangle = \varphi_{\mathbf{k}}^{\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (6)$$

L'indice n (ou j) qui repérait un vecteur de base dans les compléments précédents est maintenant remplacé par deux indices, \mathbf{k} et ν (qui sont indépendants, contrairement aux indices n et ν_n utilisés au § 3-e du Complément G_{XV}). Nous supposons enfin que l'interaction entre particules est invariante par translation : $W_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ne dépend que de $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

Nous allons voir que, dans un tel cas, on peut trouver des solutions des équations de Hartree-Fock sans avoir à rechercher les fonctions propres de l'opérateur

(de Hartree-Fock) écrit au membre de gauche de (3) ; ces solutions sont simplement les ondes planes écrites en (5). Le seul calcul qui reste alors à faire est celui de leurs valeurs propres $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k},\nu}$, qui peuvent s'interpréter comme les énergies d'objets indépendants appelés "quasi-particules" (§ 2-b).

Remarque :

Nous allons vérifier que ces ondes planes sont solutions des équations de Hartree-Fock, tout en n'étant pas nécessairement les seules solutions, ni même celles qui conduisent à l'énergie la plus basse du système total. Il peut en effet se produire un phénomène de "brisure de la symétrie" (ici symétrie de translation) qui introduit des solutions dont le module varie dans l'espace et conduisent effectivement à une énergie plus basse. Un exemple en est le cristal d'électrons de Wigner, où la densité des particules acquiert spontanément une modulation spatiale périodique. Un autre exemple de brisure spontanée de symétrie sera discuté au § 3-c de ce complément. Il existe bien d'autres cas (en particulier en physique nucléaire) où la méthode de Hartree-Fock permet d'étudier des phénomènes de brisure de symétrie.

2-a. Calcul des énergies

Comme les ondes planes sont évidemment fonctions propres de l'énergie cinétique, et comme le potentiel est nul à l'intérieur de la boîte, reste à démontrer qu'elles sont également fonctions propres du potentiel direct et du potentiel d'échange. En effet, si nous reportons (5) dans (4), nous obtenons :

$$\begin{aligned} V_{\text{dir}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}',\nu'} f_{\beta}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}',\nu'} - \mu) \int d^3 r'' W_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \\ &= \frac{\bar{V}_0}{L^3} \sum_{\mathbf{k}',\nu'} f_{\beta}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}',\nu'} - \mu) \end{aligned} \tag{7}$$

où \bar{V}_0 est défini par (avec un changement de variable $\mathbf{r} - \mathbf{r}'' = \mathbf{s}$) :

$$\bar{V}_0 = \int d^3 r'' W_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') = \int d^3 s W_2(\mathbf{s}) \tag{8}$$

Le potentiel direct est donc une constante indépendante de la position \mathbf{r} ; multipliant une exponentielle $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, il donne une fonction qui lui est proportionnelle, de sorte que $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ en est bien fonction propre. Pour le potentiel d'échange, on obtient à partir de la seconde relation (4) :

$$V_{\text{ex}}^{\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}'} f_{\beta}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}',\nu} - \mu) e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} W_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{9}$$

Le potentiel d'échange est donc, lui aussi, invariant par translation (il ne dépend que de la différence $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$). Le dernier terme du membre de gauche de (3) s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \frac{\eta}{L^3} \sum_{\mathbf{k}'} f_{\beta}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}',\nu} - \mu) \int d^3 r' e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} W_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}}{L^{3/2}} \\ = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}'} f_{\beta}(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}',\nu} - \mu) \frac{\eta}{L^3} \bar{V}(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{10}$$

où (avec le changement de variable $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = \mathbf{s}$) :

$$\bar{V}_{(\mathbf{k}'-\mathbf{k})} = \int d^3s e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{s}} W_2(\mathbf{s}) \quad (11)$$

Le terme d'échange multiplie donc simplement l'onde plane $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}/L^{3/2}$ par :

$$\frac{\eta}{L^3} \sum_{\mathbf{k}'} f_{\beta}(\tilde{e}_{\mathbf{k},\nu} - \mu) \bar{V}_{(\mathbf{k}'-\mathbf{k})} \quad (12)$$

Pour finir, pour un système uniforme, les ondes planes sont solutions des équations de Hartree-Fock (3). Il n'est donc plus nécessaire de résoudre des équations aux vecteurs propres, mais seulement de remplacer dans (3) les $\varphi_{\mathbf{k}}^{\nu}(\mathbf{r})$ par des ondes planes. Ceci conduit à :

$$\tilde{e}_{\mathbf{k},\nu} = e_k + \frac{\bar{V}_0}{L^3} \sum_{\mathbf{k}',\nu'} f_{\beta}(\tilde{e}_{\mathbf{k}',\nu'} - \mu) + \frac{\eta}{L^3} \sum_{\mathbf{k}'} f_{\beta}(\tilde{e}_{\mathbf{k}',\nu} - \mu) \bar{V}_{(\mathbf{k}'-\mathbf{k})} \quad (13)$$

où e_k est l'énergie cinétique d'une particule libre :

$$e_k = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \quad (14)$$

Nous obtenons ainsi des conditions d'auto-cohérence des valeurs propres, qui prennent la forme d'un ensemble d'équations couplées et non linéaires du fait de la dépendance des $f_{\beta}(\tilde{e}_{\mathbf{k}',\nu} - \mu)$ en énergies $\tilde{e}_{\mathbf{k}',\nu}$.

Remarque :

Le terme d'échange contient la transformée de Fourier à la fréquence spatiale $\mathbf{k}' - \mathbf{k}$ du potentiel d'interaction entre particules; en revanche, le terme direct contient la composante de fréquence spatiale nulle. Cette propriété se comprend bien physiquement. Considérons en effet deux particules d'impulsions initiales respectives $\hbar\mathbf{k}$ et $\hbar\mathbf{k}'$. Nous avons vu au Chapitre VIII (§ B.4.a) que l'effet au premier ordre (approximation de Born) d'un potentiel d'interaction est proportionnel à la transformée de Fourier de ce potentiel calculée pour la variation de l'impulsion relative entre les particules (Chapitre VII, § B.2.a); cette variation n'est autre que le transfert d'impulsion entre ces particules au cours de l'interaction. Il est donc naturel que l'énergie du système soit la somme de deux termes : un terme direct où aucune particule ne change d'impulsion (pas de transfert d'impulsion, d'où une variable de Fourier nulle); un autre où les deux particules échangent leur impulsion, de sorte que l'impulsion relative change de signe, d'où une variable de Fourier proportionnelle à la différence $\mathbf{k}' - \mathbf{k}$.

2-b. Quasi-particules

Les équations (13) donnent des énergies individuelles $\tilde{e}_{\mathbf{k},\nu}$, sommes de l'énergie $\hbar^2 k^2/2m$ d'une particule libre et d'une contribution des interactions. On peut alors considérer que ce sont les énergies d'objets individuels¹, souvent appelés "quasi-particules". Les populations des niveaux correspondants, ainsi que le nombre total

1. La notion de quasi-particules n'est pas nécessairement limitée aux systèmes dont les particules en interaction sont libres à l'intérieur d'une boîte; elle reste valide lorsque le potentiel V_1 n'est pas nul (potentiel harmonique par exemple). Le premier terme de (13) est alors remplacé par l'énergie d'une particule dans le potentiel V_1 , et les termes directs et d'échange s'expriment différemment.

de quasi-particules, sont donnés par les mêmes fonctions de distribution f_β que pour un gaz parfait – cf. relations (39) et (44) du Complément G_{XV}. Il en est de même pour l'entropie S du système, comme nous l'avons remarqué à la fin du § 2-b- α de ce complément. A condition de remplacer les énergies des particules libres par les énergies modifiées $\tilde{e}_{\mathbf{k},\nu}$, l'analogie avec des particules indépendantes est donc très réelle.

3. Magnétisme spontané de fermions répulsifs

Considérons un système de fermions de spin 1/2 contenus dans une boîte. Pour rendre les calculs plus aisés, nous allons faire quelques hypothèses simplificatrices. Nous verrons qu'elles conduisent à un modèle simple qui illustre bien le caractère non linéaire de la théorie de Hartree-Fock, car elles demandent la résolution d'un système d'équations non linéaires contenant deux variables seulement – les équations que nous écrirons en (22).

3-a. Un modèle simple

Nous supposons que le potentiel d'interaction mutuelle est répulsif et de très courte portée r_0 . Dans (13) jouent un rôle tous les vecteurs \mathbf{k} et \mathbf{k}' pour lesquels les distributions $f_\beta(\tilde{e}_{\mathbf{k},\nu} - \mu)$ et $f_\beta(\tilde{e}_{\mathbf{k}',\nu} - \mu)$ ne sont pas négligeables. Si, pour tous ces vecteurs, les produits kr_0 et $k'r_0$ sont très petits devant 1, il est possible de remplacer dans (11) le produit $(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{s}$ par zéro, de sorte que :

$$\bar{V}_{(\mathbf{k}'-\mathbf{k})} \simeq \bar{V}_0 \quad (15)$$

$\alpha.$ *Energie des quasi-particules ; populations des états de spin*

Compte tenu du fait que $\eta = -1$ pour des fermions, l'équation (13) se simplifie en :

$$\tilde{e}_{\mathbf{k},\nu} = e_k + \frac{\bar{V}_0}{L^3} \left[\sum_{\mathbf{k}',\nu'} f_\beta(\tilde{e}_{\mathbf{k}',\nu'} - \mu) - \sum_{\mathbf{k}'} f_\beta(\tilde{e}_{\mathbf{k}',\nu} - \mu) \right] \quad (16)$$

soit encore :

$$\tilde{e}_{\mathbf{k},\nu} = e_k + \frac{\bar{V}_0}{L^3} \sum_{\mathbf{k}',\nu' \neq \nu} f_\beta(\tilde{e}_{\mathbf{k}',\nu'} - \mu) \quad (17)$$

Ainsi, l'énergie d'une quasi-particule de ν donné n'est modifiée que par interaction avec les quasi-particules dont la composante du spin ν' est différente (spins opposés si les particules sont de spin $S = 1/2$). Ce résultat traduit simplement le fait que, si les spins des deux quasi-particules sont parallèles, rien ne permet de les distinguer ; le principe de Pauli intervient pleinement et les empêche de s'approcher à la distance r_0 , donc d'interagir. En revanche, si leurs spins sont opposés, elles sont en principe reconnaissables à la direction de leur spin (nous avons supposé que l'interaction ne modifie pas les spins) et se comportent comme des particules discernables ; l'effet d'exclusion ne se produit plus, de sorte que leurs interactions peuvent jouer un rôle.

Appelons alors $\langle \widehat{N}_+ \rangle$ et $\langle \widehat{N}_- \rangle$ respectivement le nombre total de particules dans l'état de spin + ou - :

$$\langle \widehat{N}_\pm \rangle = \sum_{\mathbf{k}'} f_\beta(\tilde{e}_{\mathbf{k}', \pm} - \mu) \quad (18)$$

La formule (17) montre que les énergies des états de spin + et - sont modifiées selon :

$$\tilde{e}_{\mathbf{k},+} = e_k + g \langle \widehat{N}_- \rangle \quad ; \quad \tilde{e}_{\mathbf{k},-} = e_k + g \langle \widehat{N}_+ \rangle \quad (19)$$

où la constante de couplage g (homogène à une énergie) est définie par :

$$g = \frac{\overline{V}_0}{L^3} \quad (20)$$

Puisque les nombres de particules ne dépendent que des différences entre les énergies \tilde{e} et le potentiel chimique μ , on peut tenir compte de l'effet des termes en g dans (19) en gardant les énergies e_k de particules libres mais en diminuant les potentiels chimiques μ_\pm d'une quantité $g \langle \widehat{N}_\pm \rangle$. Si, comme dans la relation (47) du Complément B_{XV}, nous appelons $N_{gp}^{FD}(\beta, \mu)$ le nombre total de fermions pour un gaz parfait :

$$N_{gp}^{FD}(\beta, \mu) = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \int d^3k \frac{1}{e^{\beta(e_k - \mu)} + 1} \quad (21)$$

nous obtenons ainsi, pour un gaz en interaction :

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \widehat{N}_+ \rangle = N_{gp}^{FD}(\beta, \mu - g \langle \widehat{N}_- \rangle) \\ \langle \widehat{N}_- \rangle = N_{gp}^{FD}(\beta, \mu - g \langle \widehat{N}_+ \rangle) \end{array} \right\} \quad (22)$$

Ces équations déterminent les populations des deux états de spin en fonction des paramètres β (ou la température), μ et enfin le volume \mathcal{V} . Il s'agit cependant de deux équations couplées, puisque la population $\langle \widehat{N}_+ \rangle$ dépend de $\langle \widehat{N}_- \rangle$ et inversement, de sorte que leur solution n'est pas évidente. Pour l'obtenir, nous allons recourir à un changement de variables et à une construction graphique.

β . *Changement de variables*

Il est commode d'écrire les relations précédentes en termes de variables sans dimension. Introduisons pour cela la "longueur d'onde thermique" λ_T par :

$$\lambda_T = \hbar \sqrt{\frac{2\pi}{mk_B T}} = \hbar \sqrt{\frac{2\pi\beta}{m}} \quad (23)$$

Nous pouvons alors effectuer le même changement de variable d'intégration que celui du § 4-a du Complément B_{XV} :

$$\kappa = k \frac{\lambda_T}{2\sqrt{\pi}} \quad (24)$$

La relation (21) devient alors :

$$N_{gp}^{FD}(\beta, \mu) = \left(\frac{L}{\lambda_T}\right)^3 I_{3/2}(\beta\mu) \quad (25)$$

où :

$$I_{3/2}(\beta\mu) = \pi^{-3/2} \int d^3\kappa \frac{1}{e^{\kappa^2 - \beta\mu} + 1} \quad (26)$$

Ces deux relations ne sont autres que celles déjà été écrites en (51) et (52) au Complément B_{XV}. La valeur de $I_{3/2}$ ne dépend que d'une variable sans dimension, le produit $\beta\mu$. Contrairement à N_{gp}^{FD} qui est une grandeur "extensive" (proportionnelle² au volume $\mathcal{V} = L^3$ du système considéré), $I_{3/2}(\beta\mu)$ est une grandeur "intensive" (indépendante du volume).

Nous pouvons également remplacer les deux inconnues, qui sont les populations $\langle \hat{N}_{\pm} \rangle$ des deux états de spins, par deux variables intensives et sans dimension x_{\pm} :

$$x_{\pm} = \left(\frac{\lambda_T}{L}\right)^3 \langle \hat{N}_{\pm} \rangle \quad (27)$$

Pour caractériser les interactions qui apparaissent dans les relations (22) par l'intermédiaire de la constante g , nous introduisons le paramètre sans dimension \bar{g} :

$$\bar{g} = \beta g \left(\frac{L}{\lambda_T}\right)^3 = \frac{m\bar{V}_0}{2\pi\hbar\lambda_T} \quad (28)$$

Alors, si l'on remplace dans les équations (22) les $\langle \hat{N}_{\pm} \rangle$ par les x_{\pm} et g par \bar{g} , on obtient la forme plus simple :

$$\begin{cases} x_+ = F^{(1)}(x_-) \\ x_- = F^{(1)}(x_+) \end{cases} \quad (29)$$

où la fonction $F^{(1)}$ est définie par :

$$F^{(1)}(x) = I_{3/2}(\beta\mu - \bar{g}x) \quad (30)$$

(en sus de la variable x , cette fonction dépend des paramètres $\beta\mu$ et \bar{g}). Comme (22), le système (29) contient deux équations couplées : x_- permet de calculer directement x_+ , et inversement.

3-b. Résolution des équations par itération graphique

Nous allons maintenant indiquer comment les équations (29) peuvent être résolues par une méthode graphique. On peut découpler les deux variables x_+ et x_- en remarquant que :

$$x_+ = F^{(1)} \left[F^{(1)}(x_+) \right] \quad (31)$$

2. De façon plus générale, on rappelle dans l'appendice VI qu'une grandeur est dite extensive si, à la limite des grands volumes (à T et μ constants), son rapport avec le volume \mathcal{V} tend vers une constante ; ceci n'exclut pas que la grandeur contienne des termes en L^2 par exemple. Elle est dite intensive si, dans cette limite (et sans division par le volume), elle tend vers une constante.

ainsi que la même équation pour x_- . Donc, si nous introduisons la fonction itérée d'ordre deux $F^{(2)}$ de la fonction $F^{(1)}$ (la fonction de la même fonction), par :

$$F^{(2)}(x) = F[F(x)] \quad (32)$$

nous obtenons :

$$x_+ = F^{(2)}(x_+) \quad (33)$$

Si nous appliquons la fonction $F^{(2)}$ à la variable x , nous retrouvons donc la même valeur x . On dit alors que x est l'abscisse d'un "point fixe" de cette fonction. Graphiquement, on obtient les points fixes d'une fonction F quelconque par intersection de la courbe représentant la fonction F avec la première bissectrice.

α. Itérations d'une fonction

De façon générale, considérons l'équation :

$$x = G(x) \quad (34)$$

dans les solutions correspondent aux points fixes de la fonction G . Ces solutions peuvent être recherchées par itération : on part d'une valeur x_1 approchée de la solution, on calcule $G(x_1)$, puis on prend $x_2 = G(x_1)$ comme nouvelle valeur de la variable pour calculer $x_3 = G(x_2)$, etc. On montre que cette itération permet de converger vers la solution de l'équation (34), donc vers le point fixe sur la première bissectrice, si la pente de la fonction en ce point est comprise entre -1 et $+1$, soit si :

$$-1 < G'(x) < +1 \quad (35)$$

où G' est la dérivée de la fonction G . On dit alors que le point fixe de l'application G est stable. En revanche, lorsque cette pente sort de l'intervalle $[-1, +1]$, le point fixe sur la première bissectrice devient instable ; la convergence de la méthode d'itération de G est alors perdue.

On peut également introduire la fonction "itérée d'ordre deux" $G^{(2)}(x) = G[G(x)]$. Tout point fixe de G est nécessairement un point fixe de $G^{(2)}$, mais pas inversement. Il est en effet possible d'obtenir un "cycle d'ordre deux" où deux valeurs différentes de x s'échangent sous l'effet de G :

$$\begin{aligned} x_2 &= G(x_1) \\ x_1 &= G(x_2) \end{aligned} \quad (36)$$

Dans un tel cas, x_1 et x_2 sont tous deux points fixes de $G^{(2)}$, mais pas de G (nous verrons plus bas un exemple d'une telle situation, illustrée par la Figure 3). Ces points fixes peuvent être stables pour $G^{(2)}$, cas auquel ils constituent un "cycle stable d'ordre deux" pour la fonction initiale G : au bout d'un certain nombre d'itérations de G , la solution converge vers une série prenant alternativement deux valeurs distinctes x_1 et x_2 .

Le processus peut d'ailleurs se répéter : il est possible que le point fixe de $G^{(2)}$ devienne instable à son tour, et qu'il donne lieu à des points fixes d'une itérée d'ordre plus élevé que deux, donc à un cycle stable de cet ordre.

β . Allure de la fonction $F^{(1)}$

La relation (25) montre que l'allure des variations de $I_{3/2}(x)$ en fonction de x est celle de $N_{gp}^{FD}(\beta, \mu)$ en fonction de μ , déjà étudiée au Complément B_{XV} (Figure 2). L'égalité (30) indique que l'allure des variations de $F^{(1)}(x)$ s'obtient à partir de celles de $I_{3/2}(x)$:

- en renversant la variable x (symétrie par rapport à l'axe vertical) ;
- en multipliant cette variable par \bar{g} (changement d'échelle sur l'axe des abscisses) ;
- et enfin en décalant vers la droite l'origine des abscisses de la quantité $\beta\mu$.

Ceci conduit à la courbe en traits pleins sur la Figure 1, qui représente (à β , μ et \bar{g} constants) une fonction constamment décroissante.

Lorsque le paramètre \bar{g} varie (à β et μ constants), on obtient ainsi un réseau de courbes représentant $F^{(1)}(x)$ pour chaque valeur de \bar{g} . Lorsque $x = 0$, toutes ces courbes passent par le même point d'ordonnée $I_{3/2}(\beta\mu)$. Si $\bar{g} = 0$, la courbe est simplement une droite horizontale passant en ce point. Lorsque \bar{g} devient faiblement positif, la courbe devient décroissante, mais reste très étalée le long de l'axe des abscisses ; elle a une faible pente négative à l'origine. Lorsque \bar{g} devient de plus en plus grand, la courbe se ramasse de plus en plus vers l'axe des ordonnées, et la pente à l'origine devient de plus en plus négative. Pour finir, à la limite où \bar{g} est infini, elle devient une droite verticale.

γ . Allure de la fonction $F^{(2)}$

La Figure 1 indique également la construction géométrique qui permet de passer de $F^{(1)}$ à $F^{(2)}$: pour une valeur de x donnée, on part du point M_1 d'ordonnée $F^{(1)}(x)$, puis de ce point on trace une horizontale jusqu'à couper la première bissectrice en M_2 , ce qui reporte l'ordonnée de M_1 sur l'abscisse ; à l'intersection, on trace une verticale qui coupe la fonction au point M_3 d'ordonnée $F^{(2)}(x)$, qu'il ne reste plus qu'à reporter à l'abscisse initiale x (point final entouré d'un triangle).

Cette construction montre que $F^{(2)}(x)$ est une fonction croissante de x entre deux asymptotes horizontales : l'axe des abscisses et une horizontale d'ordonnée $I_{3/2}(\beta\mu)$. Sa croissance est d'autant plus rapide que la valeur de \bar{g} est plus élevée.

δ . Influence du paramètre de couplage sur les points fixes

Discutons maintenant l'influence du paramètre $\bar{g} \sim \bar{V}_0$ sur la stabilité du (ou des) points fixes.

(i) Le cas trivial où $\bar{V}_0 = \bar{g} = 0$ (pas d'interaction entre les fermions) est particulièrement simple : les deux courbes sont alors des horizontales confondues, dont la pente nulle rend leur intersection avec la première bissectrice évidemment stable. On retrouve alors les résultats du gaz parfait, avec des densités x_+ et x_- égales.

(ii) Tant que \bar{g} (donc \bar{V}_0) reste suffisamment petit, la pente de $F^{(1)}$ au point d'intersection reste faible, et le point fixe correspondant est toujours stable, comme indiqué sur la Figure 1. Pour $F^{(2)}$, ce même point est évidemment point fixe ; comme la dérivée d'une fonction $f[f(x)]$ par rapport à x est $f'[f(x)]f'(x)$, soit $[f'(x)]^2$ en un point où $x = f(x)$, la pente de $F^{(2)}$ est inférieure à 1, de sorte que ce point fixe est lui aussi stable.

Dans un tel cas, les deux fonctions n'ont qu'un seul point fixe commun, qui détermine la seule solution des équations; les nombres x_+ et x_- sont alors nécessairement égaux, puisqu'il s'agit d'un point fixe de $F^{(1)}$. Le seul effet de la répulsion entre fermions est de diminuer de façon égale les densités associées à chacun des deux états de spin.

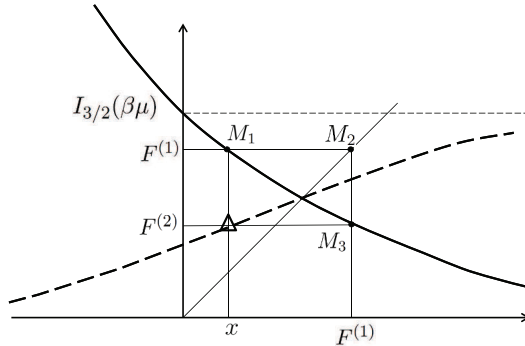


FIGURE 1 – Variations de la fonction $F^{(1)}$ (trait plein) et $F^{(2)}$ (traits tiretés) en fonction de x . Partant d'une valeur initiale quelconque de la variable x , on place un point M_1 sur la courbe de la première itérée $F^{(1)}$, que l'on reporte ensuite sur l'axe des x en utilisant la première bissectrice (point M_2) et une nouvelle intersection verticale avec la courbe en trait plein (point M_3). Ceci fournit la valeur de l'itérée d'ordre deux $F^{(2)}$, qu'il suffit ensuite de reporter à l'abscisse initiale de la variable (point repéré par un triangle). On peut ainsi construire, point par point, l'ensemble de la courbe tiretée. Cette méthode montre que, lorsque $x \rightarrow -\infty$, la courbe est asymptote à l'axe des abscisses; lorsque $x \rightarrow +\infty$, la courbe admet une autre asymptote horizontale d'ordonnée $F^{(1)}(0) = I_{3/2}(\beta\mu)$, représentée en petits tiretés. L'allure générale de l'itérée d'ordre deux est donc celle montrée sur la figure, une fonction croissant uniformément entre ces deux valeurs asymptotiques. Dans le cas représenté ici, la constante de couplage \bar{g} est supposée suffisamment faible pour que les deux courbes coupent la première bissectrice avec une pente inférieure à 1 en module; on a ainsi une solution stable unique, où x_- et x_+ sont égaux, ce qui correspond à un système de spins non polarisés.

(iii) Cependant, lorsque \bar{g} (ou \bar{V}_0) devient plus grand, on atteint pour une certaine valeur critique g_c de g une situation où la pente de $F^{(1)}$ au point d'intersection avec la première bissectrice devient égale à -1 , celle de $F^{(2)}$ prenant alors la valeur $+1$. La situation critique correspondante est représentée sur la Figure 2, où l'on voit que la courbe représentant la fonction $F^{(2)}$ devient tangente à la première bissectrice au point d'intersection (elle lui est même osculatrice³, ne s'en éloignant qu'au troisième ordre). Pour les deux fonctions, le point fixe se trouve alors juste à

3. La dérivée première de la fonction $f[f(x)]$ est égale à $f'(x) \times f'[f(x)]$, donc sa dérivée seconde à $f''(x)f'[f(x)] + [f'(x)]^2 f''[f(x)]$. En un point fixe, cette dérivée seconde devient $f'(x)f''(x)[1 + f'(x)]$, qui s'annule lorsque $f'(x) = -1$.

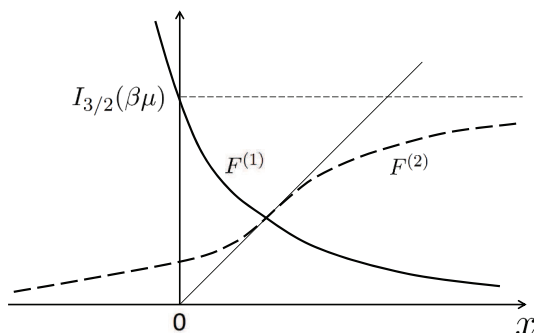


FIGURE 2 – Représentation des variations de la fonction $F^{(1)}$ (traits pleins) et $F^{(2)}$ (traits tirés) dans le cas critique $g = g_c$ où, au point d'intersection avec la première bissectrice, la pente de la fonction $F^{(1)}$ devient égale à -1 ; la pente de $F^{(2)}$ est alors égale à $+1$, et cette fonction devient non seulement tangente mais aussi osculatrice à la première bissectrice (en d'autres termes, elle coupe cette bissectrice en trois points confondus).

la frontière de son domaine de stabilité.

(iv) Au-delà, comme le montre la Figure 3, la courbe représentant $F^{(2)}$ coupe la première bissectrice en trois points ; celui du milieu est instable puisqu'il correspond à une pente plus grande que 1, mais les deux points extrêmes sont stables puisqu'ils sont associés à des pentes comprises entre -1 et $+1$. Pour le point central, la moindre perturbation éloigne l'itération de ce point. En revanche, les deux points extrêmes sont des points fixes stables de $F^{(2)}$; ils correspondent donc à une solution physiquement acceptable des équations (29). Comme ces deux points fixes ne le sont pas pour $F^{(1)}$, deux valeurs différentes, x_+ et x_- , s'échangent sous l'action de la fonction $F^{(1)}$ (cycle d'ordre deux, représenté par les flèches sur la figure). Nous obtenons ainsi une solution des équations où les populations des deux états de spin sont maintenant différentes : le gaz se polarise donc spontanément lorsque la répulsion dépasse une certaine valeur critique, où se produit donc une transition de phase.

Remarque :

Pour des raisons de commodité, nous avons discuté l'émergence de la polarisation spontanée en fonction du paramètre $\bar{g} \sim \bar{V}_0$ à β et μ constants, car le tracé des courbes se ramène dans ce cas à un simple changement d'échelle sur l'axe des x . Cependant, en général, on observe plutôt une transition de phase en faisant varier, soit la densité du système physique, soit sa température, tout en gardant constantes les interactions. Notre raisonnement s'adapte également à ce cas : il est effectivement possible de le reprendre sans changer les interactions et en faisant varier, soit le potentiel chimique μ qui contrôle la densité de particules, soit encore l'inverse β de la température. En effet, quand l'un quelconque de ces deux paramètres croît,

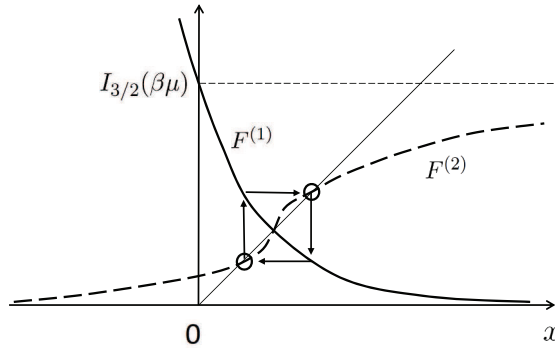


FIGURE 3 – Au-delà du point critique, la fonction $F^{(1)}$ coupe la première bissectrice avec une pente inférieure à -1 , et la fonction $F^{(2)}$ la coupe en trois points distincts. Pour cette fonction, le point du centre ayant une pente supérieure à 1 est instable, mais les deux points extrêmes (signalés par des cercles) sont stables. Ces deux points s'échangent sous l'effet de $F^{(1)}$ et engendrent ainsi un cycle d'ordre deux symbolisé par les flèches. Ils donnent lieu à des valeurs différentes des deux densités de spin, ce qui correspond à l'apparition spontanée d'une polarisation des spins.

l'ordonnée à l'origine $I_{3/2}(\beta\mu)$ croît également, ce qui augmente les pentes (en valeur absolue) de $F^{(1)}$ et de $F^{(2)}$; le même phénomène que plus haut (instabilité et transition de phase) se produit donc lorsque la température diminue ou la densité augmente. Lorsque $I_{3/2}(\beta\mu) \gg 1$, la relation (25) montre que le nombre de particules se trouvant dans un volume $(\lambda_T)^3$ est grand devant un, ce qui signifie que la distance moyenne entre particules est plus petite que la longueur d'onde thermique ; le gaz de fermions est alors dégénéré.

3-c. Discussion physique

Comme les spins portent un moment magnétique, une polarisation spontanée des spins signifie une transition vers une phase ferromagnétique. L'origine de ce phénomène est dans un équilibre entre tendances opposées. D'une part, le "moteur" de la transition tient au fait que, pour minimiser l'énergie de répulsion, le système tend à mettre toutes ses particules dans le même état de spin (système polarisé), de sorte qu'elles n'interagissent plus : le principe de Pauli leur interdit alors de se trouver au même point de l'espace, et elles ne peuvent plus interagir dans le cadre de l'approximation de portée nulle du potentiel que nous avons utilisée. Mais, d'autre part, la polarisation du système (à densité totale constante) augmente son énergie cinétique : il faut en effet loger le même nombre de particules dans une seule sphère de Fermi, au lieu de deux, ce qui conduit à une sphère de plus grand rayon, c'est-à-dire à un niveau de Fermi plus élevé. Cela modifie également son entropie. Le compromis entre le gain et les pertes (pour le grand potentiel) varie en fonction des paramètres ; lorsque ces paramètres prennent une valeur où gain et pertes s'équilibrent exactement, il apparaît une transition ferromagnétique spontanée.

Une étude plus détaillée serait possible ; en examinant la forme des courbes dans les figures que nous avons tracées, on constate que les conditions qui favorisent la transition sont : forte répulsion, forte densité, basse température. Il est important de noter que nul hamiltonien agissant sur les spins n'intervient dans cette transition de phase : même si les interactions sont totalement indépendantes du spin, la statistique de Fermi-Dirac les affecte d'une façon qui introduit une transition orientant les spins.

Au point critique (Figure 2), les deux nouveaux points stables apparaissent au même endroit, puis s'éloignent de façon continue l'un de l'autre. La transition de phase en question est donc continue, ce qui la range dans la catégorie des transitions du second ordre. L'étude des transitions critiques est un grand domaine de la physique, que nous ne pouvons pas aborder ici de façon générale. Il n'est cependant pas compliqué d'aller un peu plus loin dans l'analyse en constatant sur les équations que nous avons écrites que la distance entre ces deux points stables croît, au-delà du point critique situé en $\mu = \mu_c$ et $\beta = \beta_c$, comme la racine carrée de l'écart $\mu - \mu_c$ (ou $\beta - \beta_c$). En d'autres termes, l'aimantation spontanée du système varie comme la racine carrée de la distance au point critique, ce qui est typique de ce que l'on appelle une "bifurcation de Hopf". De plus, au point critique, la susceptibilité magnétique du système de spins diverge.

Remarques :

(i) Une autre notion très générale intervient ici, celle de brisure spontanée de symétrie. Nous constatons en premier lieu une brisure de la symétrie entre les deux directions opposées sur l'axe de quantification Oz . Les équations (29) sont en effet invariantes si l'on échange x_+ et x_- ; pour toute solution des équations, il en existe une autre où ces deux variables sont échangées, et où l'aimantation de spin pointe donc dans la direction opposée. C'est parfaitement normal puisque rien ne distingue physiquement ces deux directions. La symétrie est dite brisée si les solutions stables du système d'équations sont asymétriques, correspondant à des valeurs différentes de x_+ et x_- ; il existe alors nécessairement (au moins) deux solutions distinctes, symétriques l'une de l'autre.

De plus, l'axe de quantification Oz que nous avons utilisé est arbitraire ; en le choisissant dans une direction différente, nous aurions trouvé que l'aimantation spontanée peut pointer dans n'importe quelle direction de l'espace. C'est tout aussi normal puisque le problème que nous avons traité est invariant par rotation. Ainsi le phénomène de transition ferromagnétique que nous avons examiné correspond-il à une brisure spontanée de la symétrie de rotation dans l'espace habituel, souvent appelée en termes de groupe de symétrie "brisure de symétrie $SO(3)$ ". Il existe bien d'autres transitions du second ordre qui brisent des groupes de symétrie divers, par exemple la symétrie $U(1)$ pour la transition superfluide, etc.

(ii) Une théorie de champ moyen comme celle que nous avons utilisée – donc une théorie approchée – permet de signaler l'existence d'une transition critique (transition du second ordre) comme nous l'avons fait, mais pas de cerner tous ses aspects, en particulier à proximité du point critique ; il existe des propriétés critiques (fluctuations critiques de grandes longueurs d'onde) qui échappent totalement à une telle approximation, et demandent de recourir à des méthodes théoriques plus élaborées.

4. Bosons : équation d'état, instabilité attractive

Pour des bosons, les équations (3) sont très semblables à celles que nous avons utilisées pour les fermions, à condition de changer le signe de η , donc du potentiel

d'échange. Pour un système peu dégénéré, ceci modifie les effets des interactions, mais ne modifie pas de façon dramatique leurs conséquences. En revanche, pour un système de bosons dégénéré, la situation devient radicalement différente car l'expression (1) présente une singularité lorsque $(e - \mu)$ s'annule – alors qu'il ne s'en produit aucune pour des fermions. Comme nous l'avons vu au Complément B_{XV}, c'est l'origine du phénomène de “condensation de Bose-Einstein” : quand le potentiel chimique μ croît, la singularité commence à jouer un rôle quand μ s'approche (par valeurs inférieures) de l'énergie individuelle la plus faible parmi tous les e_i , c'est-à-dire l'énergie e_0 du niveau fondamental. La population de ce niveau croît alors de plus en plus et peut devenir “extensive” (proportionnelle au volume \mathcal{V} du système à la limite des grands volumes).

En fait, pour les systèmes de bosons condensés, l'utilisation des équations de Hartree-Fock rencontre quelques difficultés, sur lesquelles nous reviendrons brièvement – cf. Remarque (ii) du § 4-a ci-dessous. Nous nous limiterons donc ici à l'étude des systèmes non condensés, sans pour autant exclure qu'ils approchent la condensation. Nous supposons que les bosons sont sans spin et, comme pour les fermions, que la portée de leur potentiel d'interaction $W_2(\mathbf{s})$ qui apparaît dans la relation (11) est suffisamment courte pour que :

$$\bar{V}_{(\mathbf{k}'-\mathbf{k})} = V_0 \quad (37)$$

Dans ce cas, les contributions directe et d'échange dans (13) sont égales. Pour un système homogène, cette équation devient alors :

$$\tilde{e}_{\mathbf{k}} = e_{\mathbf{k}} + \frac{2\bar{V}_0}{L^3} \sum_{\mathbf{k}'} f_{\beta}(\tilde{e}_{\mathbf{k}'} - \mu) = e_{\mathbf{k}} + \frac{2\bar{V}_0}{L^3} \langle N \rangle \quad (38)$$

où $\langle N \rangle$ est la valeur moyenne du nombre total de particules ;

$$\langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}} f_{\beta}(\tilde{e}_{\mathbf{k}} - \mu) = \sum_{\mathbf{k}} f_{\beta}(e_{\mathbf{k}} - \mu - \Delta\mu) \quad (39)$$

avec :

$$\Delta\mu = -\frac{2\bar{V}_0}{L^3} \langle N \rangle \quad (40)$$

Ainsi, le nombre total de particules est le même que celui d'un gaz de bosons sans interactions, pourvu que le potentiel chimique μ soit remplacé par un potentiel chimique effectif $\tilde{\mu} = \mu + \Delta\mu$. Il en est de même de la population moyenne de chaque état individuel \mathbf{k} .

Comme au Complément B_{XV}, nous appelons $N_{gp}^{BE}(\beta, \mu)$ la fonction qui donne le nombre de particules pour un gaz parfait de bosons :

$$N_{gp}^{BE}(\beta, \mu) = \sum_{\mathbf{k}} f_{\beta}(e_{\mathbf{k}} - \mu) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{1}{e^{\beta(e_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1} \quad (41)$$

(la seconde égalité est valable pour les grands volumes). L'équation (39) devient alors :

$$\langle N \rangle = N_{gp}^{BE}(\beta, \tilde{\mu}) \equiv N_{gp}^{BE}(\beta, \mu + \Delta\mu) \quad (42)$$

4-a. Bosons répulsifs

Si les interactions sont répulsives, la Figure 4 indique la construction géométrique qui permet d'obtenir graphiquement la densité du système prédite par l'équation (42). L'effet des répulsions est de diminuer le nombre de particules à potentiel chimique donné, ce qui éloigne le système de l'état condensé ; sa description par les équations de Hartree-Fock est alors une bonne approximation.

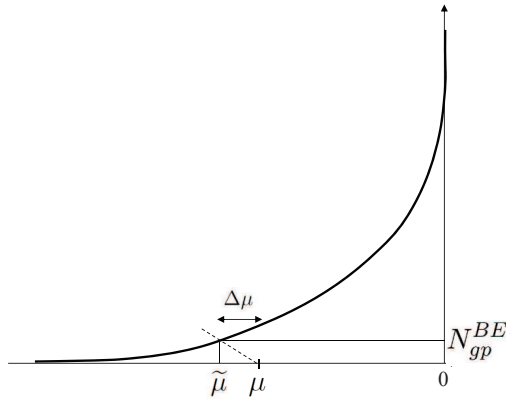


FIGURE 4 – Solution géométrique des équations (40) et (42) pour un gaz de bosons répulsifs. Sur le graphique donnant le nombre total de particules en fonction du potentiel chimique, on trace à partir du point de l'axe des abscisses de potentiel chimique μ une droite (traits tiretés) dont la pente est $-L^3/2\bar{V}_0$. L'abscisse du point d'intersection avec la courbe donne alors $\tilde{\mu}$ et son ordonnée la valeur de N_{gp}^{BE} . Comme \bar{V}_0 est positif pour un gaz répulsif, on voit que les interactions diminuent la densité (à température et potentiel chimiques constants). Le texte explique comment cette construction géométrique permet d'obtenir l'équation d'état du gaz en interaction.

Si l'on se limite au premier ordre en \bar{V}_0 , la relation (42) s'écrit approximativement :

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &\simeq N_{gp}^{BE}(\beta, \mu) + \Delta\mu \frac{\partial}{\partial \mu} N_{gp}^{BE}(\beta, \mu) \\ &= N_{gp}^{BE}(\beta, \mu) - 2\bar{V}_0 \frac{N_{gp}^{BE}(\beta, \mu)}{L^3} \frac{\partial}{\partial \mu} N_{gp}^{BE}(\beta, \mu) \end{aligned} \quad (43)$$

Or, si $\Phi(\beta, \mu)$ est le grand-potentiel, la relation (62) de l'Appendice VI indique que :

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \text{Log} Z = - \frac{\partial}{\partial \mu} \Phi(\beta, \mu) \quad (44)$$

Par intégration sur μ de (43) de $-\infty$ à la valeur μ , on obtient alors le grand potentiel :

$$\Phi(\beta, \mu) = \Phi_{gp}(\beta, \mu) + \frac{\bar{V}_0}{L^3} [N_{gp}^{BE}(\beta, \mu)]^2 \quad (45)$$

où $\Phi_{gp}(\beta, \mu)$ est le grand potentiel du gaz parfait de même température et même potentiel chimique. De plus, la relation (62) de l'Appendice VI indique que le grand potentiel est égal à l'opposé du produit du volume par la pression P :

$$\Phi(\beta, \mu) = -PV \quad (46)$$

Donc, si à β constant on fait varier le paramètre μ dans (43) et (45), on obtient dans le plan $(\langle N \rangle, P)$ une courbe qui représente la pression en fonction du nombre de particules dans le volume \mathcal{V} , c'est-à-dire une ligne isotherme de l'équation d'état. En répétant le tracé pour diverses valeurs de β , on obtient le réseau de courbes couvrant l'ensemble de cette équation d'état, compte tenu des modifications introduites par les interactions.

Remarques :

(i) Pour simplifier les calculs autant que possible, nous nous sommes limités au premier ordre en \bar{V}_0 ; il est cependant possible de revenir à la construction graphique plus précise de la Figure 4 pour inclure les ordres suivants.

(ii) Nous avons discuté au § 3-b- β du Complément G_{XV} les limites de l'approximation de Hartree-Fock pour des bosons, et avons vu qu'elle n'est plus applicable lorsque le système physique approche trop de la condensation de Bose-Einstein. Le construction graphique de la Figure 4 perd donc son sens physique si le point d'intersection obtenu sur la courbe tombe trop près du point de contact de la courbe avec l'axe vertical.

4-b. Bosons attractifs

Si les interactions sont attractives ($\bar{V}_0 < 0$), leur effet est d'augmenter le potentiel chimique effectif, et donc aussi d'augmenter la valeur de $\langle N \rangle$. Ceci tend à son tour à augmenter le potentiel chimique effectif et, par un effet de réaction en boucle, peut même induire un effet d'emballement et conduire à une instabilité si μ est trop proche de zéro.

La construction géométrique qui permet d'obtenir $\Delta\mu$ et $\langle N \rangle$ par intersection d'une droite avec une courbe est indiquée sur la Figure 5. Si \bar{V}_0 est suffisamment faible, pour une valeur de μ fixée, deux points d'intersection existent qui fixent des solutions possibles. En fait, on ne retient que le premier, celui pour lequel $\Delta\mu$ a une valeur faible. L'autre solution correspond en effet à une valeur élevée de $\Delta\mu$, dont l'effet est de changer radicalement la densité du système (qui augmente considérablement) ; dans ce cas il semble probable que le traitement approché des interactions en champ moyen ne reste plus valable. Mais, au-delà de la valeur de \bar{V}_0 pour laquelle la droite est tangente à la courbe, le couple d'équations (39) et (40) n'a plus de solution : il n'existe plus aucune solution stable.

La Figure 5 montre également que, plus le potentiel chimique est proche de zéro, plus l'effet d'interactions attractives entre bosons est marqué ; il suffit d'interactions de faible intensité pour rendre le système instable. La raison pour laquelle nous ne trouvons aucune solution aux équations est que, dans nos calculs, nous avons supposé le système parfaitement homogène ; or cette homogénéité devient impossible à maintenir au-delà d'une certaine intensité de l'attraction. Il faut donc élargir le cadre théorique et inclure la possibilité pour le système de devenir spontanément inhomogène ; une étude plus précise montrerait effectivement qu'il peut développer des instabilités locales, rompant ainsi spontanément la symétrie d'invariance par

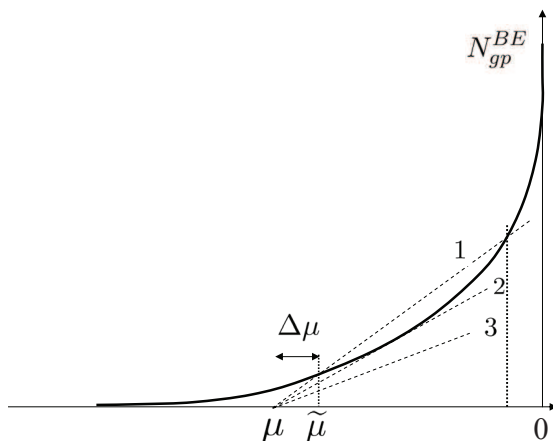


FIGURE 5 – Construction graphique similaire à celle de la Figure 4, mais pour un gaz de Bose attractif (où \bar{V}_0 est négatif). Lorsque le potentiel d'attraction \bar{V}_0 n'est pas trop grand, la droite notée 1 sur la figure conduit à deux solutions possibles, dont une seule est proche de la solution en l'absence d'interaction, donc à retenir dans le cadre de l'approximation faite. Puis, lorsque \bar{V}_0 augmente, pour une valeur critique on obtient une seule solution (droite tangente 2), puis plus aucune (droite 3). Dans ce dernier cas, l'absence de solution indique une instabilité du gaz, que les interactions attractives font s'effondrer sur lui-même. Si l'on part d'un gaz parfait presque condensé, les interactions attractives qui déclenchent l'instabilité sont d'autant plus faibles que le gaz initial est plus proche de la condensation.

translation. On verrait ainsi que, à la limite des grands systèmes (limite thermodynamique), un ensemble de bosons condensé tend à s'effondrer sur lui-même sous l'effet d'une interaction attractive, si faible soit-elle⁴.

En conclusion générale, pour des fermions la méthode de Hartree-Fock permet d'obtenir des résultats qui restent valables dans un domaine très large de paramètres ; on peut par exemple calculer les effets des interactions sur le nombre de particules et la pression du système. De plus, cette méthode permet de prévoir l'existence de transitions de phase. Pour des bosons non dégénérés, c'est également vrai et, de fait, la méthode du champ moyen trouve de très nombreuses applications qu'il n'est pas possible de détailler ici. Il faut cependant garder à l'esprit que, lorsque la condensation de Bose-Einstein se produit, certaines de ses prédictions relatives au condensat peuvent s'écarter de la réalité physique, car elles dépendent trop fortement de l'approximation du champ moyen qui ne traite pas exactement les corrélations entre particules.

4. Si le potentiel d'interaction est attractif à grande distance, mais fortement répulsif à courte distance (cœurs durs par exemple), le système forme spontanément un liquide ou un solide de densité élevée.

Chapitre XVI

Opérateur champ

A	Définition de l'opérateur champ	172
A-1	Définition	172
A-2	Relations de commutation ou d'anticommutation	174
B	Opérateurs symétriques	175
B-1	Expression générale	176
B-2	Exemples simples	176
B-3	Fonctions de corrélation spatiales du champ	178
B-4	Opérateur hamiltonien	182
C	Evolution dans le temps de l'opérateur champ (point de vue de Heisenberg)	184
C-1	Contribution de l'énergie cinétique	184
C-2	Contribution de l'énergie potentielle	185
C-3	Contribution de l'énergie d'interaction	185
C-4	Evolution globale	185
D	Lien avec la quantification d'un champ	186

Introduction

Ce chapitre fait usage des mêmes outils mathématiques que le chapitre précédent, dont il constitue une suite directe. La différence principale est que, jusqu'ici, nous avons mis l'accent sur l'utilisation de bases discrètes dans l'espace des états individuels, $\{|u_i\rangle\}$ ou $\{|v_s\rangle\}$. Ici, nous utiliserons une base continue, pour des particules sans spin la base $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ des vecteurs propres de la position (Chapitre II, § E). Comme ils dépendent alors de la position \mathbf{r} , les opérateurs d'annihilation et de création deviennent des champs d'opérateurs dépendant d'un indice continu \mathbf{r} . Ce sont des analogues operatoriels de champs classiques (qui, eux, sont des nombres et non pas des opérateurs), et ils sont souvent appelés "opérateurs champ". Ils sont utiles pour décrire de façon compacte de nombreuses propriétés de systèmes de particules

identiques ; ils sont munis de relations de commutation pour des bosons, d'anticommutation pour des fermions. Ce chapitre constitue une préparation aux Chapitres XIX et XX, où nous introduirons la quantification du champ électromagnétique.

Dans le § A-1, nous donnons la définition de ces opérateurs, puis nous discutons un certain nombre de leurs propriétés. Au § A-2, nous examinons les relations de commutation et d'anticommutation de ces opérateurs. Comme au Chapitre XV, nous étudierons ensuite (§ B) les opérateurs symétriques et leur expression en fonction des opérateurs champ ; nous discuterons tout particulièrement les opérateurs associés aux fonctions de corrélation du champ. Dans le § C, nous passerons dans le point de vue de Heisenberg pour étudier la dépendance en temps de ces opérateurs. Enfin (§ D) nous conclurons en revenant succinctement sur la procédure de quantification des champs et son lien avec la notion de particules identiques.

A. Définition de l'opérateur champ

L'opérateur champ est défini comme opérateur d'annihilation a_i , mais relatif à une base d'états individuels faisant intervenir l'indice de position continu \mathbf{r} au lieu d'un indice discret i . Notre point de départ sera la relation de changement de base (A-52) du Chapitre XV :

$$a_{v_s} = \sum_i \langle v_s | u_i \rangle a_{u_i} \tag{A-1}$$

où les indices i et s repèrent les kets de deux bases orthonormées $\{|u_i\rangle\}$ et $\{|v_s\rangle\}$ dans l'espace des états individuels. Dans ce qui suit, et comme dans le Chapitre XV, nous simplifierons souvent l'indice u_i en i , ainsi que l'indice v_s en s .

A-1. Définition

Nous commençons par définir l'opérateur champ pour des particules sans spin, puis généralisons ensuite au cas où elles ont un spin.

A-1-a. Particules sans spin

Dans la relation (A-1), remplaçons la base $\{|v_s\rangle\}$ par la base des vecteurs $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, où \mathbf{r} symbolise trois indices continus (les composantes de ce vecteur). L'opérateur a_s devient alors un opérateur qui dépend de l'indice continu \mathbf{r} , que nous appellerons "*opérateur champ*" du système de particules identiques considéré. On pourrait le noter simplement $a_{\mathbf{r}}$ mais, pour nous conformer à l'usage, nous utiliserons la notation classique $\Psi(\mathbf{r})$. Comme tout opérateur d'annihilation, $\Psi(\mathbf{r})$ agit dans l'espace de Fock, où il diminue le nombre de particules d'une unité. Dans (A-1), le coefficient sous la somme est maintenant la fonction d'onde $u_i(\mathbf{r})$ associée au ket $|u_i\rangle$:

$$u_i(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | u_i \rangle \tag{A-2}$$

de sorte que cette relation devient :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_i u_i(\mathbf{r}) a_i \tag{A-3}$$

Formellement, la définition (A-3) ressemble au développement d'une fonction d'onde sur des fonctions de base $u_i(\mathbf{r})$; mais, ici, les "composantes" a_i sont des opérateurs, et non plus de simples nombres complexes. De même que a_s annihile une particule dans l'état $|v_s\rangle$, de même l'opérateur $\Psi(\mathbf{r})$ annihile une particule au point \mathbf{r} .

Il ne dépend pas de la base $\{|u_i\rangle\}$, c'est-à-dire des fonctions d'onde choisies pour le définir dans (A-3); en effet, insérons dans cette égalité la relation de fermeture sur une base quelconque $\{|v_s\rangle\}$, puis utilisons à nouveau (A-1) :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_i \sum_s \langle \mathbf{r} | v_s \rangle \langle v_s | u_i \rangle a_{u_i} = \sum_s \langle \mathbf{r} | v_s \rangle a_{v_s} \quad (\text{A-4})$$

(nous revenons provisoirement à la notation explicite des opérateurs d'annihilation).
Donc :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_s v_s(\mathbf{r}) a_{v_s} \quad (\text{A-5})$$

de sorte que $\Psi(\mathbf{r})$ satisfait, dans la nouvelle base, à une relation semblable à (A-3).

Prenons le conjugué hermitique de (A-3) :

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_i u_i^*(\mathbf{r}) a_i^\dagger \quad (\text{A-6})$$

L'opérateur $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ crée une particule au point \mathbf{r} ; on peut le vérifier en calculant par exemple le ket obtenu par son action sur le vide :

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}) |0\rangle = \sum_i u_i^*(\mathbf{r}) a_i^\dagger |0\rangle = \sum_i u_i^*(\mathbf{r}) |u_i\rangle \quad (\text{A-7})$$

soit :

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}) |0\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | \mathbf{r} \rangle = |\mathbf{r}\rangle \quad (\text{A-8})$$

qui représente effectivement une particule localisée en \mathbf{r} .

On peut aisément inverser les formules (A-3) et (A-6) en écrivant par exemple :

$$\begin{aligned} \int d^3r u_i^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) &= \int d^3r u_i^*(\mathbf{r}) \sum_j u_j(\mathbf{r}) a_j \\ &= \sum_j \delta_{ij} a_j = a_i \end{aligned} \quad (\text{A-9})$$

ou bien, par conjugaison hermitique :

$$\int d^3r u_i(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}) = a_i^\dagger \quad (\text{A-10})$$

A-1-b. Particules à spin

Lorsque les particules ont un spin S , la base des vecteurs $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ utilisée précédemment doit être remplacée par la base des vecteurs $\{|\mathbf{r}, \nu\rangle\}$, où ν est l'indice de

spin qui prend $2S + 1$ valeurs discrètes distinctes ($\nu = -S, -S + 1, \dots, +S$). A toutes les sommations sur d^3r , il faut maintenant adjoindre une sommation sur les $2S + 1$ valeurs de l'indice ν de spin. Par exemple, un vecteur de base $|u_i\rangle$ dans l'espace des états individuels s'écrit maintenant :

$$|u_i\rangle = \sum_{\nu=-S}^{+S} \int d^3r u_i(\mathbf{r}, \nu) |\mathbf{r}, \nu\rangle \quad (\text{A-11})$$

avec :

$$u_i(\mathbf{r}, \nu) = \langle \mathbf{r}, \nu | u_i \rangle \quad (\text{A-12})$$

Les variables \mathbf{r} et ν jouent un rôle similaire. Cependant la première est continue, alors que la seconde est discrète, de sorte que leur écriture dans une même parenthèse risquerait de masquer cette différence. C'est pourquoi l'on préfère souvent mettre l'indice discret en indice de la fonction u_i , et écrire par exemple :

$$u_i^\nu(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \nu | u_i \rangle \quad (\text{A-13})$$

Utilisons à nouveau la relation (A-1). Dans le membre de gauche, l'indice v_s symbolise maintenant à la fois la position \mathbf{r} et le nombre quantique de spin ν , ce qui nous conduit à définir un opérateur champ $\Psi_\nu(\mathbf{r})$ à $2S + 1$ composantes de spin. Reportant alors (A-13) dans le membre de droite de (A-1), nous obtenons :

$$\boxed{\Psi_\nu(\mathbf{r}) = \sum_i u_i^\nu(\mathbf{r}) a_i} \quad (\text{A-14})$$

L'opérateur hermitique conjugué $\Psi_\nu^\dagger(\mathbf{r})$ crée alors une particule au point \mathbf{r} avec un spin ν :

$$\Psi_\nu^\dagger(\mathbf{r}) |0\rangle = \sum_i \langle u_i | \mathbf{r}, \nu \rangle |u_i\rangle = |\mathbf{r}, \nu\rangle \quad (\text{A-15})$$

Comme plus haut, nous pouvons inverser ces relations. Dans la relation (A.51) du Chapitre XV (changement de base), remplaçons v_s par i et u_i par \mathbf{r}, ν (donc la sommation sur i par une intégrale sur d^3r et une somme sur ν), et reportons l'égalité (A-11) ; nous obtenons :

$$a_i^\dagger = \sum_{\nu=-S}^{+S} \int d^3r u_i^\nu(\mathbf{r}) \Psi_\nu^\dagger(\mathbf{r}) \quad (\text{A-16})$$

qui est l'analogie, en présence de spin, de la relation (A-10).

A-2. Relations de commutation ou d'anticommutation

Les relations de commutation des opérateurs champ sont analogues à celles que nous avons obtenues au § A-5 du Chapitre XV, mais dans un cas où l'indice discret i est remplacé par un indice continu.

A-2-a. Particules sans spin

Le commutateur (ou anticommutateur) de deux opérateurs champ :

$$[\Psi(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}')]_{-\eta} = \sum_{i,j} u_i(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}') [a_i, a_j]_{-\eta} = 0 \quad (\text{A-17})$$

est bien nul, comme l'expression (A-48) du Chapitre XV permettait de s'y attendre. De même, par conjugaison hermitique :

$$[\Psi^\dagger(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')]_{-\eta} = \sum_{i,j} u_i^*(\mathbf{r}) u_j^*(\mathbf{r}') [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_{-\eta} = 0 \quad (\text{A-18})$$

Mais, lorsque l'on (anti)commute opérateur champ et opérateur adjoint, on obtient :

$$[\Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')]_{-\eta} = \sum_{i,j} u_i(\mathbf{r}) u_j^*(\mathbf{r}') [a_i, a_j^\dagger]_{-\eta} \quad (\text{A-19})$$

qui donne, compte tenu des relations de commutation (A-49) du Chapitre XV :

$$[\Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')]_{-\eta} = \sum_i u_i(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') = \sum_i \langle \mathbf{r} | u_i \rangle \langle u_i | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle \quad (\text{A-20})$$

Pour finir, il vient :

$$\boxed{[\Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')]_{-\eta} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') } \quad (\text{A-21})$$

qui est l'équivalent des relations (A-49) du Chapitre XV dans le cas d'une base continue.

A-2-b. Particules à spin

La relation (A-17) devient :

$$[\Psi_\nu(\mathbf{r}), \Psi_{\nu'}(\mathbf{r}')]_{-\eta} = \sum_{i,j} u_i^\nu(\mathbf{r}) u_j^{\nu'}(\mathbf{r}') [a_i, a_j]_{-\eta} = 0 \quad (\text{A-22})$$

La relation (A-18) reste également valable si les opérateurs champ ont des indices de spin. Enfin la relation (A-19) devient :

$$\begin{aligned} [\Psi_\nu(\mathbf{r}), \Psi_{\nu'}^\dagger(\mathbf{r}')]_{-\eta} &= \sum_{i,j} u_i(\mathbf{r}, \nu) u_j^*(\mathbf{r}', \nu') [a_i, a_j^\dagger]_{-\eta} \\ &= \langle \mathbf{r}, \nu | \mathbf{r}', \nu' \rangle \end{aligned} \quad (\text{A-23})$$

donc :

$$\boxed{[\Psi_\nu(\mathbf{r}), \Psi_{\nu'}^\dagger(\mathbf{r}')]_{-\eta} = \delta_{\nu\nu'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') } \quad (\text{A-24})$$

B. Opérateurs symétriques

Au chapitre précédent, nous avons écrit les opérateurs symétriques à une ou deux particules en termes des opérateurs de création et d'annihilation dans des états discrets $|u_i\rangle$. Nous nous proposons maintenant d'exprimer ces opérateurs symétriques en termes de l'opérateur champ (et de son hermitique conjugué).

B-1. Expression générale

Commençons par le cas de particules sans spin. Nous pouvons, soit transposer directement les expressions (B-12) et (C-16) du Chapitre XV à une base continue $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ (en y remplaçant les sommes par des intégrales), soit insérer dans ces expressions la forme (A-9) des opérateurs a_i . Dans les deux cas, il vient :

$$\widehat{F} = \int d^3r \int d^3r' \langle \mathbf{r} | \widehat{f} | \mathbf{r}' \rangle \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') \quad (\text{B-1})$$

et :

$$\widehat{G} = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \int d^3r'' \int d^3r''' \langle 1 : \mathbf{r} ; 2 : \mathbf{r}' | \widehat{g} | 1 : \mathbf{r}'' ; 2 : \mathbf{r}''' \rangle \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}''') \Psi(\mathbf{r}'') \quad (\text{B-2})$$

où, comme dans la relation (C-16) du Chapitre XV, l'ordre des opérateurs d'annihilation est interverti par rapport à celui qui intervient dans le ket de l'élément de matrice.

L'expression (B-1) rappelle celle de la valeur moyenne $\langle \widehat{f}(1) \rangle$ de l'opérateur $\widehat{f}(1)$ d'une particule unique (sans spin) décrite par la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}_1)$:

$$\langle \widehat{f}(1) \rangle = \int d^3r_1 \int d^3r'_1 \langle \mathbf{r}_1 | \widehat{f} | \mathbf{r}'_1 \rangle \psi^*(\mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}'_1) \quad (\text{B-3})$$

Elle ne lui est cependant pas équivalente puisqu'elle concerne un nombre quelconque de particules identiques, et non pas une seule ; de plus, les Ψ sont ici des opérateurs, de sorte que leur ordre relatif n'est pas indifférent – contrairement à celui des ψ dans (B-3). Pour la formule (B-2), la valeur moyenne dont elle peut être rapprochée est celle d'un opérateur $\widehat{g}(1, 2)$ agissant sur deux particules 1 et 2, décrites toutes deux par la même fonction d'onde ψ ; ici aussi, l'ordre des opérateurs champ est important, contrairement à ce qui est le cas pour un produit de fonctions d'onde.

Pour des particules à spin, il suffit d'adjoindre à chaque intégrale sur \mathbf{r} une somme sur l'indice de spin ν , d'inclure cet indice dans les éléments de matrice, et enfin de munir l'opérateur champ d'un indice de spin. Par exemple, la relation (B-1) se généralise en :

$$\widehat{F} = \int d^3r \int d^3r' \sum_{\nu=-S}^S \sum_{\nu'=-S}^S \langle \mathbf{r}, \nu | \widehat{f} | \mathbf{r}', \nu' \rangle \Psi_\nu^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_{\nu'}(\mathbf{r}') \quad (\text{B-4})$$

Dans la relation (B-2) apparaissent maintenant quatre sommations sur des indices de spin ν , tandis que les éléments de matrice de l'opérateur sont pris entre des bras et des kets où un indice ν s'ajoute à la variable \mathbf{r} .

B-2. Exemples simples

Commençons par quelques exemples portant sur des opérateurs à une particule sans spin. Pour une particule unique, l'opérateur associé à la densité de présence au point \mathbf{r}_0 est :

$$|\mathbf{r}_0\rangle \langle \mathbf{r}_0| \quad (\text{B-5})$$

dont les éléments de matrice s'écrivent :

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0) \quad (\text{B-6})$$

L'opérateur à N particules correspondant a pour expression :

$$\widehat{D}^{(N)}(\mathbf{r}_0) = \sum_{q=1}^N |q : \mathbf{r}_0 \rangle \langle q : \mathbf{r}_0 | \quad (\text{B-7})$$

La substitution de $|\mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 |$ à \widehat{f} dans (B-1) donne l'opérateur agissant dans l'espace de Fock :

$$\widehat{D}(\mathbf{r}_0) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}_0)\Psi(\mathbf{r}_0) \quad (\text{B-8})$$

Cet opérateur annihile une particule au point \mathbf{r}_0 et la recrée aussitôt au même point. La valeur moyenne :

$$\widehat{D}(\mathbf{r}_0) = \langle \Phi | \widehat{D}(\mathbf{r}_0) | \Phi \rangle \quad (\text{B-9})$$

dans un état normé $|\Phi \rangle$ du système à N particules donne la densité de particules associée à cet état au point \mathbf{r}_0 .

L'opérateur \widehat{N} , nombre total de particules, a été écrit en (B-15) du Chapitre XV ; lorsque l'indice discret de sommation i est changé en l'indice continu \mathbf{r} , la sommation devient une intégrale dans tout l'espace :

$$\widehat{N} = \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) \quad (\text{B-10})$$

C'est donc l'intégrale sur d^3r de l'opérateur $\widehat{D}(\mathbf{r})$, comme on pouvait s'y attendre.

L'opérateur décrivant l'énergie potentielle à une particule $V_1(\mathbf{r})$ est également diagonal en représentation position ; dans l'espace de Fock, il prend la forme de l'opérateur \widehat{V}_1 :

$$\widehat{V}_1 = \int d^3r V_1(\mathbf{r})\Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) \quad (\text{B-11})$$

Quant au courant de particules, il peut être déduit de l'expression du courant $\widehat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}_0)$ associé à une particule unique de masse m ; c'est le produit des opérateurs donnant la densité locale $|\mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 |$ et la vitesse $\widehat{\mathbf{p}}/m$ (produit qu'il convient évidemment de symétriser) :

$$\widehat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}_0) = \frac{1}{2} \left[|\mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \frac{\widehat{\mathbf{p}}}{m} + \frac{\widehat{\mathbf{p}}}{m} |\mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \right] \quad (\text{B-12})$$

Si la particule est décrite par une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$, un calcul simple¹ montre que la valeur moyenne de cet opérateur redonne l'expression habituelle du courant

1. Calculons en effet la valeur moyenne $\langle \Psi | \widehat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}_0) | \Psi \rangle$. Le premier terme du second membre de (B-12) donne :

$$\frac{1}{2m} \langle \Psi | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \widehat{\mathbf{p}} | \Psi \rangle = \frac{\hbar}{2mi} \Psi^*(\mathbf{r}_0) \nabla \psi(\mathbf{r}_0) \quad (\text{B-13})$$

puisque l'action de l'opérateur $\widehat{\mathbf{p}}$ en représentation position est donnée par $(\hbar/i)\nabla$. Le second terme est le complexe conjugué, de sorte que l'on obtient (B-14).

de probabilité – voir équation (D-17) du Chapitre III :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}_0) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\mathbf{r}_0) \nabla \psi(\mathbf{r}_0) - \psi(\mathbf{r}_0) \nabla \psi^*(\mathbf{r}_0)] \quad (\text{B-14})$$

Le courant $\mathbf{J}(\mathbf{r}_0)$ d'un système de particules identiques s'obtient en remplaçant dans (B-1) l'opérateur \hat{f} par $\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}_0)$:

$$\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r}_0) = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^\dagger(\mathbf{r}_0) \nabla \Psi(\mathbf{r}_0) - \Psi(\mathbf{r}_0) \nabla \Psi^\dagger(\mathbf{r}_0)] \quad (\text{B-15})$$

Une autre façon d'obtenir cette égalité est d'utiliser le procédé de substitution mentionné au § B-1 : pour obtenir l'opérateur recherché en fonction de $\Psi(\mathbf{r})$, on part de l'expression de la valeur moyenne pour une seule particule de fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$, que l'on remplace ensuite par l'opérateur champ $\Psi(\mathbf{r})$.

Pour des particules à spin, la densité de présence au point \mathbf{r}_0 avec un spin ν s'écrit de même :

$$\hat{D}^{(N)}(\mathbf{r}_0, \nu) = \sum_{q=1}^N |q : \mathbf{r}_0, \nu\rangle \langle q : \mathbf{r}_0, \nu| \quad (\text{B-16})$$

qui, dans l'espace de Fock, engendre l'opérateur :

$$\hat{D}(\mathbf{r}_0, \nu) = \Psi_\nu^\dagger(\mathbf{r}_0) \Psi_\nu(\mathbf{r}_0) \quad (\text{B-17})$$

La densité totale s'obtient par sommation sur ν :

$$\hat{D}(\mathbf{r}_0) = \sum_{\nu=-S}^S \Psi_\nu^\dagger(\mathbf{r}_0) \Psi_\nu(\mathbf{r}_0) \quad (\text{B-18})$$

Lorsque les particules ont un spin, l'opérateur \hat{N} associé au nombre total de particules, ou encore l'opérateur courant de probabilité $\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{r}_0}$, s'obtiennent de façon analogue.

B-3. Fonctions de corrélation spatiales du champ

Les opérateurs champ permettent également de définir des opérateurs associés aux fonctions de corrélation spatiale ; leurs valeurs moyennes sont très utiles pour caractériser les propriétés du champ en différents points de l'espace. Quand on raisonne en termes de champ, il est habituel de caractériser chaque fonction de corrélation par le nombre de points pris en compte, mais cela introduit une différence par rapport au décompte du nombre de particules : les fonctions à deux points concernent les propriétés relatives à une seule particule, celles à quatre points concernent deux particules, etc. La raison en est simple : la caractérisation d'un opérateur densité à une particule ρ_I implique la donnée des éléments non diagonaux $\langle \mathbf{r}'_0 | \rho_I | \mathbf{r}_0 \rangle$ dépendant de deux positions, celle d'un opérateur densité à deux particules ρ_{II} la donnée d'un élément dépendant de quatre positions, etc.

B-3-a. Fonction de corrélation à deux points

On peut généraliser (B-5) en définissant un opérateur non diagonal dépendant de deux paramètres \mathbf{r}_0 et \mathbf{r}'_0 :

$$|\mathbf{r}_0\rangle \langle \mathbf{r}'_0| \quad (\text{B-19})$$

Un calcul très semblable à celui qui a mené à l'équation (B-7) – il suffit d'affecter un “prime” au second \mathbf{r}_0 – conduit à l'opérateur symétrique à N particules :

$$\widehat{D}^{(N)}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0) = \sum_{q=1}^N |q : \mathbf{r}_0\rangle \langle q : \mathbf{r}'_0| \quad (\text{B-20})$$

qui engendre dans l'espace de Fock l'opérateur :

$$\widehat{D}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}_0)\Psi(\mathbf{r}'_0) \quad (\text{B-21})$$

Nous avons ainsi un opérateur qui annihile une particule au point \mathbf{r}'_0 puis la recrée en un point différent \mathbf{r}_0 .

Lorsque le système des N particules est décrit par l'état quantique quelconque $|\Phi\rangle$, on appelle *fonction de corrélation du champ à deux points*, $G_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0)$, la valeur moyenne :

$$G_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0) = \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}_0)\Psi(\mathbf{r}'_0) \rangle = \langle \Phi | \Psi^\dagger(\mathbf{r}_0)\Psi(\mathbf{r}'_0) | \Phi \rangle \quad (\text{B-22})$$

qui donne également l'élément de matrice en représentation $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ de l'opérateur densité ρ_I à une particule² :

$$\langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}_0)\Psi(\mathbf{r}'_0) \rangle = \langle \mathbf{r}'_0 | \rho_I | \mathbf{r}_0 \rangle \quad (\text{B-23})$$

Démonstration :

L'opérateur densité $\rho_I^{(q)}$ de la particule q a pour éléments de matrice :

$$\langle \mathbf{r}'_0 | \rho_I^{(q)} | \mathbf{r}_0 \rangle = \text{Tr} \left\{ \rho_I^{(q)} |q : \mathbf{r}_0\rangle \langle q : \mathbf{r}'_0| \right\} = \langle |q : \mathbf{r}_0\rangle \langle q : \mathbf{r}'_0| \rangle \quad (\text{B-24})$$

Pour un système de N particules, nous définissons l'opérateur densité à une particule ρ_I par une somme sur toutes les particules :

$$\rho_I = \sum_{q=1}^N \rho_I^{(q)} \quad (\text{B-25})$$

(attention : la trace de cet opérateur est N , et non pas 1). Ses éléments de matrice sont alors la somme des valeurs moyennes écrites en (B-24), c'est-à-dire la valeur moyenne de l'opérateur symétrique à une particule obtenu en sommant sur q les $|q : \mathbf{r}_0\rangle \langle q : \mathbf{r}'_0|$. Le résultat n'est autre que l'opérateur $\widehat{D}^{(N)}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0)$ de (B-20). Ce dernier, comme nous l'avons vu, engendre dans l'espace de Fock l'expression (B-21). Il suffit alors de prendre la valeur moyenne des deux membres de cette expression pour obtenir l'égalité (B-23).

2. On notera l'inversion de l'ordre des variables entre la fonction G_1 (ou les variables de Ψ^\dagger et Ψ) et celles de l'élément de matrice de ρ_I .

La valeur moyenne en deux points différents (B-22) joue un rôle important dans l'étude de la condensation de Bose-Einstein. Pour un système à l'équilibre thermique, cette valeur moyenne tend généralement vers zéro rapidement lorsque la distance entre \mathbf{r} et \mathbf{r}' augmente; le domaine où elle reste non nulle est de taille microscopique. Cependant, pour un gaz ayant subi la condensation de Bose-Einstein, le comportement de la valeur moyenne change complètement, puisqu'elle tend à grande distance vers une valeur non nulle. Cette différence fournit le "critère de condensation de Penrose et Onsager"; ceux-ci définissent l'existence d'une telle condensation par l'apparition d'une valeur non nulle de l'élément de matrice de ρ_I à grande distance; la définition est générale puisqu'elle s'applique, non seulement au gaz parfait, mais également aux systèmes de particules en interaction.

Particules de spin non nul :

Si les particules ont un spin S non nul, on utilise la base des kets $|\mathbf{r}, \nu\rangle$ où ν prend les $(2S+1)$ valeurs $-S, -S+1, \dots, +S$, et on affecte un indice ν aux opérateurs de champ. On définit alors $(2S+1)^2$ fonctions de corrélation du champ à deux points comme les valeurs moyennes :

$$\langle \Psi_{\nu}^{\dagger}(\mathbf{r}_0) \Psi_{\nu'}(\mathbf{r}'_0) \rangle = G_1(\mathbf{r}_0, \nu; \mathbf{r}'_0, \nu') \quad (\text{B-26})$$

Le calcul qui mène à (B-23) pour des particules sans spin se répète sans autre changement que le simple remplacement des kets (ou bras) $|\mathbf{r}\rangle$ par $|\mathbf{r}, \nu\rangle$; il montre que ces valeurs moyennes donnent les éléments de matrice de l'opérateur densité à une particule :

$$\langle \mathbf{r}'_0, \nu' | \rho_I | \mathbf{r}_0, \nu \rangle = \langle \Psi_{\nu}^{\dagger}(\mathbf{r}_0) \Psi_{\nu'}(\mathbf{r}'_0) \rangle \quad (\text{B-27})$$

(ici aussi, nous choisissons une normalisation à N de la trace de l'opérateur densité à une particule).

B-3-b. Fonctions de corrélation d'ordre supérieur

On peut également partir de l'opérateur à deux particules dépendant de quatre positions :

$$\widehat{g}(1 : \mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0; 2 : \mathbf{r}''_0, \mathbf{r}'''_0) = |1 : \mathbf{r}_0\rangle \langle 1 : \mathbf{r}'_0| \otimes |2 : \mathbf{r}''_0\rangle \langle 2 : \mathbf{r}'''_0| \quad (\text{B-28})$$

Dans ce cas, l'expression de \widehat{g} n'est pas symétrique par rapport à l'échange entre les particules 1 et 2, contrairement à ce qui se produit pour une énergie d'interaction. L'opérateur \widehat{G} est alors défini sans le facteur $1/2$ de la relation (C-1) du Chapitre XV :

$$\widehat{G}^{(N)}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0, \mathbf{r}''_0, \mathbf{r}'''_0) = \sum_{q, q'=1; q \neq q'}^N \widehat{g}(q : \mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0; q' : \mathbf{r}''_0, \mathbf{r}'''_0) \quad (\text{B-29})$$

qui engendre dans l'espace de Fock l'opérateur $\widehat{G}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0, \mathbf{r}''_0, \mathbf{r}'''_0)$. La relation (B-2), sans ce facteur $1/2$, donne alors :

$$\widehat{G}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0, \mathbf{r}''_0, \mathbf{r}'''_0) = \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}_0) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}'_0) \Psi(\mathbf{r}''_0) \Psi(\mathbf{r}'''_0) \quad (\text{B-30})$$

Cette fois, l'opérateur annihile deux particules en deux points puis les recrée en deux autres points.

Un calcul très semblable à celui qui a conduit à (B-22) et (B-23) permet, à partir de (B-2), de montrer que les éléments de matrice de l'opérateur densité à deux particules ρ_{II} s'écrivent³ :

$$\langle 1 : \mathbf{r}'_0; 2 : \mathbf{r}''_0 | \rho_{II} | 1 : \mathbf{r}_0; 2 : \mathbf{r}''_0 \rangle = \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}_0) \Psi^\dagger(\mathbf{r}''_0) \Psi(\mathbf{r}'_0) \Psi(\mathbf{r}''_0) \rangle \quad (\text{B-31})$$

Cet opérateur densité, dont la trace est égale à $N(N-1)$, joue un rôle essentiel dans l'étude des corrélations entre particules.

Un exemple particulièrement important de fonction de corrélation d'ordre supérieur est celui correspondant au cas $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}'_0$ et $\mathbf{r}''_0 = \mathbf{r}'''_0$. On obtient alors :

$$\begin{aligned} \widehat{G}^{(N)}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \mathbf{r}''_0, \mathbf{r}''_0) &= \sum_{q, q'=1; q \neq q'}^N |q : \mathbf{r}_0\rangle \langle q : \mathbf{r}_0| \otimes |q' : \mathbf{r}''_0\rangle \langle q' : \mathbf{r}''_0| \\ &= \sum_{q, q'=1; q \neq q'}^N |q : \mathbf{r}_0; q' : \mathbf{r}''_0\rangle \langle q : \mathbf{r}_0; q' : \mathbf{r}''_0| \end{aligned} \quad (\text{B-32})$$

qui engendre dans l'espace de Fock l'opérateur :

$$\widehat{G}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \mathbf{r}''_0, \mathbf{r}''_0) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}_0) \Psi^\dagger(\mathbf{r}''_0) \Psi(\mathbf{r}''_0) \Psi(\mathbf{r}_0) \quad (\text{B-33})$$

L'expression figurant au second membre de (B-32) caractérise la probabilité de trouver une particule (quelconque) en \mathbf{r}_0 et une autre (quelconque mais différente) en \mathbf{r}''_0 . De même que la valeur moyenne (B-9) donne la densité à une particule, de même la valeur moyenne :

$$\langle \widehat{G}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \mathbf{r}''_0, \mathbf{r}''_0) \rangle = \langle \Phi | \widehat{G}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \mathbf{r}''_0, \mathbf{r}''_0) | \Phi \rangle = G_2(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}''_0) \quad (\text{B-34})$$

donne la "densité double" à deux particules, qui contient les informations sur toutes les corrélations binaires entre positions des particules.

Nous pouvons alors obtenir à nouveau l'expression (C-28) du Chapitre XV et justifier plus précisément l'interprétation donnée de la valeur moyenne de l'énergie d'interaction écrite en (C-27) de ce chapitre. Pour cela, remplaçons dans (B-33) les opérateurs champ (ou leurs adjoints) par leur développement (A-3) sur les opérateurs a_i (ou les a_i^\dagger); nous obtenons alors (C-28) du Chapitre XV, \mathbf{r}_0 étant remplacé par \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}'_0 par \mathbf{r}_2 .

Si $\mathbf{r}_0 \neq \mathbf{r}''_0$, on vérifie⁴ que cet opérateur est égal au produit des densités simples définies en (B-8) :

$$\widehat{G}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \mathbf{r}''_0, \mathbf{r}''_0) = \widehat{D}(\mathbf{r}_0) \widehat{D}(\mathbf{r}''_0) \quad (\text{B-35})$$

Bien sûr, cette relation entre opérateurs ne signifie pas que la densité double $G_2(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}''_0)$ est simplement égale au produit $\langle \widehat{D}(\mathbf{r}_0) \rangle \langle \widehat{D}(\mathbf{r}''_0) \rangle$ des densités simples : la valeur

3. On peut également utiliser la relation (C-19) du Chapitre XV pour obtenir le même résultat.

4. Si les particules sont des bosons, il suffit de permuter des opérateurs qui commutent pour amener $\Psi(\mathbf{r}_0)$ en seconde position et obtenir le résultat. Si ce sont des fermions, il faut deux anticommutations successives pour effectuer cette opération, et les deux signes moins qu'elles introduisent se compensent.

moyenne d'un produit d'opérateurs n'est en général pas égale au produit des valeurs moyennes. Dans l'étude de la fonction G_2 (§ C-5-b du Chapitre XV), nous avons effectivement constaté la présence d'un terme d'échange qui introduit des "corrélations statistiques" entre particules, même en l'absence d'interactions.

Particules de spin non nul :

Pour des particules de spin non nul, il suffit d'adjoindre un indice ν à chacun des kets ou bras, ainsi qu'aux opérateurs de champ ; ceci porte à $(2S + 1)^4$ le nombre de fonctions de corrélation à 4 points. Les éléments de matrice de l'opérateur densité à deux corps sont alors donnés par les valeurs moyennes :

$$\langle 1 : \mathbf{r}', \nu'; 2 : \mathbf{r}''', \nu''' | \rho_{II} | 1 : \mathbf{r}, \nu; 2 : \mathbf{r}'', \nu'' \rangle = \left\langle \Psi_\nu^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_{\nu''}^\dagger(\mathbf{r}'') \Psi_{\nu'''}(\mathbf{r}''') \Psi_{\nu'}(\mathbf{r}') \right\rangle \tag{B-36}$$

B-4. Opérateur hamiltonien

Etablissons maintenant l'expression de l'opérateur hamiltonien d'un ensemble de particules identiques (sans spin) en termes de l'opérateur champ. Deux formules nous seront utiles pour le calcul. La première transpose à trois dimensions la formule (34) de l'Appendice II :

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \tag{B-37}$$

La seconde en découle par une double dérivation par rapport à \mathbf{r} :

$$\Delta\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k k^2 e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \tag{B-38}$$

L'énergie cinétique d'une particule a pour éléments de matrice :

$$\langle \mathbf{r} | \frac{P^2}{2m} | \mathbf{r}' \rangle = \int d^3k \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}' \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{B-39}$$

Dans l'espace de Fock, elle correspond aux opérateurs suivants (une intégration par parties⁵ permet de passer de la première relation à la seconde) :

$$\widehat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Delta\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \nabla\Psi^\dagger(\mathbf{r}) \cdot \nabla\Psi(\mathbf{r}) \tag{B-40}$$

Comme au § B-1 nous obtenons ici une expression semblable à celle de la valeur moyenne d'un opérateur (ici l'énergie cinétique) d'une particule ; mais il faut remplacer le gradient de la fonction d'onde par celui d'un opérateur champ, et l'ordre des opérateurs n'est pas indifférent.

L'hamiltonien du système inclut en général un terme d'interaction, ce qui en fait un opérateur à deux particules et nécessite l'utilisation de la formule (B-2). On sait que, pour un système de deux particules, l'interaction donne lieu à un opérateur diagonal en représentation $\{|\mathbf{r}, \mathbf{r}'\rangle\}$; en outre, il ne dépend que de la position relative

5. Les termes tout intégrés sont à l'infini, et nous supposons que tous les états du système physique sont limités à un volume fini ; ces termes ne jouent donc aucun rôle et peuvent être ignorés.

$\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ (et non de \mathbf{r} et \mathbf{r}' séparément). En conséquence, dans (B-2) l'élément de matrice prend la forme :

$$\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' | \hat{g} | \mathbf{r}'', \mathbf{r}''' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}''') \times W_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{B-41})$$

où $W_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ est l'énergie potentielle d'interaction entre deux particules situées à une position relative $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ (souvent cette interaction est isotrope, auquel cas W_2 ne dépend que de la distance relative $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$). Alors le calcul à partir de (B-2) conduit à l'expression suivante pour l'opérateur hamiltonien :

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}) + V_1(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \right] \\ & + \frac{1}{2} \int d^3r' \int d^3r'' W_2(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \Psi^\dagger(\mathbf{r}'') \Psi(\mathbf{r}'') \Psi(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (\text{B-42})$$

Le premier terme correspond à l'énergie cinétique des particules, le second au potentiel extérieur $V_1(\mathbf{r})$ agissant séparément sur chaque particule, et le troisième à l'interaction mutuelle entre particules ; on note que ce dernier terme fait intervenir quatre opérateurs champ, alors que les deux précédents en comportent seulement deux. La même remarque que plus haut s'applique : cette expression rappelle la valeur moyenne de l'énergie dans un système à deux particules, décrites toutes deux par la même fonction d'onde ; mais il s'agit ici d'opérateurs qui ne commutent pas.

L'hamiltonien peut aussi s'exprimer directement à partir des opérateurs densité simple à une particule $\hat{D}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0)$ et double à deux particules $\hat{G}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, \mathbf{r}''_0, \mathbf{r}'_0)$. Reportant les relations (B-21) et (B-30) dans l'expression (B-42), nous obtenons en effet :

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_0} \cdot \nabla_{\mathbf{r}'_0} \hat{D}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0) \Big|_{\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}'_0 = \mathbf{r}} + V_1(\mathbf{r}) \hat{D}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \right] + \\ & + \frac{1}{2} \int d^3r' \int d^3r'' W_2(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') G_2(\mathbf{r}', \mathbf{r}', \mathbf{r}'', \mathbf{r}'') \end{aligned} \quad (\text{B-43})$$

où les notations $\nabla_{\mathbf{r}_0}$ et $\nabla_{\mathbf{r}'_0}$ désignent respectivement les gradients pris par rapport aux variables \mathbf{r}_0 et \mathbf{r}'_0 ; une fois ces gradients calculés dans le terme d'énergie cinétique de (B-43), les deux variables prennent la valeur commune \mathbf{r} . Le fait que l'opérateur hamiltonien s'exprime directement en fonction des opérateurs associés aux densités simple et double peut s'avérer utile en pratique. Par exemple, pour connaître l'énergie de l'état fondamental du système de N particules, il n'est pas indispensable de calculer la fonction d'onde de cet état, qui contient toutes les corrélations d'ordre 1 à N entre les particules ; la connaissance des valeurs moyennes de ces deux densités est suffisante. Or, dans certains cas, il existe des méthodes d'approximation qui donnent directement de bonnes estimations de ces densités simple et double, et permettent ainsi d'avoir accès à l'énergie à N corps. Dans les Compléments E_{XV} et G_{XV}, nous discutons la méthode de Hartree-Fock, qui se base sur une approximation où l'opérateur densité à deux particules s'exprime simplement en fonction de l'opérateur densité à une seule particule. Il en est donc de même de la densité double en fonction de la densité simple (Complément G_{XV}, § 2-b-γ), ce qui permet d'effectuer des calculs commodes de champ moyen.

C. Evolution dans le temps de l'opérateur champ (point de vue de Heisenberg)

Jusqu'ici, les opérateurs que nous avons considérés correspondent au "point de vue de Schrödinger", où l'évolution temporelle du système est prise en compte par celle de son vecteur d'état. Il peut cependant être plus commode de choisir le point de vue de Heisenberg (Complément G_{III}), où cette évolution est transposée aux opérateurs associés aux grandeurs physiques du système. Pour des particules sans spin, appelons $\Psi_H(\mathbf{r}; t)$ l'opérateur correspondant à $\Psi(\mathbf{r})$ dans le point de vue de Heisenberg :

$$\Psi_H(\mathbf{r}; t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \Psi(\mathbf{r}) e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (\text{C-1})$$

(\hat{H} est l'opérateur hamiltonien) dont la dépendance temporelle est régie par l'équation :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_H(\mathbf{r}; t) = \left[\Psi_H(\mathbf{r}; t), \hat{H} \right] \quad (\text{C-2})$$

Nous allons donc calculer successivement le commutateur de $\Psi_H(\mathbf{r}; t)$ avec les trois termes du second membre de (B-42). L'équation d'évolution de l'opérateur champ fait intervenir tous les termes de l'hamiltonien (B-42) : énergie cinétique, potentielle, et d'interaction.

C-1. Contribution de l'énergie cinétique

Afin de déterminer le commutateur de l'opérateur champ avec l'énergie cinétique, nous commençons par transposer au point de vue de Heisenberg les équations (A-17), (A-18) et (A-21). En fait, elles sont applicables sans aucune modification : le transformé unitaire d'un produit par (C-1) est le produit des transformés unitaires, celui du commutateur (ou de l'anticommutateur) est le commutateur (ou l'anticommutateur) des transformés, et des nombres comme zéro ou la fonction $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ sont invariants. Ces trois relations restent donc encore valables si l'on utilise le point de vue de Heisenberg, par simple adjonction d'un indice H aux opérateurs champ. Dérivons-les par rapport aux positions ; seule (A-21) donne un résultat non nul :

$$\left[\Psi_H(\mathbf{r}; t), \nabla_{\mathbf{r}'} \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'; t) \right]_{-\eta} = \nabla_{\mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\nabla_{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{C-3})$$

Compte tenu de (B-40), le commutateur à évaluer s'écrit :

$$\left[\Psi_H(\mathbf{r}; t), \hat{H}_{0H}(t) \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r' \left[\Psi_H(\mathbf{r}; t), \nabla \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'; t) \cdot \nabla \Psi_H(\mathbf{r}'; t) \right] \quad (\text{C-4})$$

Dans la fonction intégrée au membre de droite, un signe η s'introduit chaque fois que nous permutons deux opérateurs champ, ou deux adjoints ; quand il s'agit d'un opérateur champ et d'un opérateur adjoint, s'ajoute au résultat le second membre de (C-3). Ajoutant et retranchant deux termes égaux, nous obtenons ainsi pour la fonction à intégrer :

$$\begin{aligned} & \Psi_H(\mathbf{r}; t) \nabla \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'; t) \cdot \nabla \Psi_H(\mathbf{r}'; t) - \eta \nabla \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'; t) \cdot (\Psi_H(\mathbf{r}; t) \nabla \Psi_H(\mathbf{r}'; t)) \\ & + \eta \nabla \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'; t) \cdot (\Psi_H(\mathbf{r}; t) \nabla \Psi_H(\mathbf{r}'; t)) - \nabla \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'; t) \cdot \nabla \Psi_H(\mathbf{r}'; t) \Psi_H(\mathbf{r}; t) \end{aligned} \quad (\text{C-5})$$

soit :

$$\begin{aligned} & \left[\Psi_H(\mathbf{r}; t), \nabla \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'; t) \right]_{-\eta} \cdot \nabla \Psi_H(\mathbf{r}'; t) \\ & + \eta \nabla \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'; t) \cdot \left[\Psi_H(\mathbf{r}; t), \nabla \Psi_H(\mathbf{r}'; t) \right]_{-\eta} \\ & = \nabla_{\mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \nabla \Psi_H(\mathbf{r}', t) \end{aligned} \quad (\text{C-6})$$

L'intégration sur $d^3 r'$ fait alors apparaître le laplacien en \mathbf{r} de l'opérateur champ, et il vient finalement :

$$\left[\Psi_H(\mathbf{r}; t), \widehat{H}_{0H}(t) \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_H(\mathbf{r}; t) \quad (\text{C-7})$$

C-2. Contribution de l'énergie potentielle

Au lieu de (C-4), c'est maintenant le commutateur :

$$\left[\Psi_H(\mathbf{r}; t), \widehat{V}_{1H}(t) \right] = \int d^3 r' V_1(\mathbf{r}') \left[\Psi_H(\mathbf{r}; t), \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'; t) \Psi_H(\mathbf{r}'; t) \right] \quad (\text{C-8})$$

qui intervient. Le calcul se mène comme le précédent, mais sans les gradients qui s'appliquaient aux opérateurs champ dépendant de \mathbf{r}' . Le membre de droite de (C-6) devient alors simplement :

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi_H(\mathbf{r}') \quad (\text{C-9})$$

et l'intégration sur $d^3 r'$ se fait aussitôt, de sorte que :

$$\left[\Psi_H(\mathbf{r}; t), \widehat{V}_{1H}(t) \right] = V_1(\mathbf{r}) \Psi_H(\mathbf{r}; t) \quad (\text{C-10})$$

C-3. Contribution de l'énergie d'interaction

C'est maintenant le commutateur de $\Psi_H(\mathbf{r}; t)$ avec un produit de quatre opérateurs qui apparaît sous une intégrale :

$$\left[\Psi_H(\mathbf{r}; t), \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'; t) \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}''; t) \Psi_H(\mathbf{r}''; t) \Psi_H(\mathbf{r}'; t) \right] \quad (\text{C-11})$$

Nous ne reproduisons pas ici le calcul, un peu lourd mais sans difficulté particulière ; comme dans les deux cas précédents, il suffit d'une application répétée des relations de commutation. Le résultat est que le commutateur du champ avec l'énergie d'interaction s'écrit :

$$\int d^3 r' W_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'; t) \Psi_H(\mathbf{r}'; t) \Psi_H(\mathbf{r}; t) \quad (\text{C-12})$$

C-4. Evolution globale

Regroupons les trois termes précédents ; nous obtenons l'équation d'évolution de l'opérateur champ sous la forme :

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta - V_1(\mathbf{r}) \right] \Psi_H(\mathbf{r}; t) = \int d^3r' W_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'; t) \Psi_H(\mathbf{r}'; t) \Psi_H(\mathbf{r}; t) \tag{C-13}$$

Le membre de gauche comporte l'opérateur différentiel de l'équation de Schrödinger habituelle pour la fonction d'onde d'une particule unique dans un potentiel $V_1(\mathbf{r})$; cependant, nous l'avons déjà souligné, Ψ n'est pas ici une simple fonction mais un opérateur. Le membre de droite comporte les effets des interactions binaires; du fait de son existence, l'équation d'évolution de l'opérateur champ n'est pas "fermée" : son évolution ne s'écrit pas seulement en fonction de cet opérateur lui-même, mais dépend aussi d'un terme contenant le produit de trois champs (ou de leurs conjugués).

Si maintenant on analyse de façon analogue l'évolution d'un tel produit de trois facteurs, on constate qu'elle s'exprime en fonction de ce produit, mais aussi d'un produit de 5 champs (ou de leurs conjugués); à son tour, l'évolution d'un produit de 5 champs en ferait intervenir 7, etc. Il apparaît ainsi une série d'équations de plus en plus compliquées (on l'appelle souvent "hiérarchie" d'équations). En général, elles sont très difficiles à résoudre exactement. C'est pourquoi il est fréquent qu'on utilise une approximation où cette hiérarchie est tronquée à un certain stade, soit en supprimant brutalement le terme de couplage à un certain ordre, soit en le remplaçant par une expression plus commode; de nombreuses méthodes différentes ont été proposées pour ce faire, la plus connue étant celle du champ moyen (Compléments E_{XV} et G_{XV}).

D. Lien avec la quantification d'un champ

Concluons par quelques mots concernant les procédures de quantification des champs et le lien avec la notion de particules identiques. Considérons une particule unique sans spin placée dans un puits de potentiel extérieur, et notons $\varphi_i(\mathbf{r})$ les fonctions d'onde associées à ses états stationnaires dans ce potentiel (l'indice i va de 1 à l'infini; nous supposons pour simplifier le spectre entièrement discret). Les $\varphi_i(\mathbf{r})$ constituent une base sur laquelle il est possible de développer toute fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ de la particule en écrivant :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \varphi_i(\mathbf{r}) \tag{D-1}$$

Nous avons déjà remarqué la similarité entre cette formule et l'égalité (A-3) où les nombres c_i sont remplacés par des opérateurs a_i . De même, les relations (B-8) et (B-15) rappellent les expressions de la densité de probabilité de présence d'une particule et de son courant de probabilité. Enfin, l'expression (B-42) est très semblable à celle de la valeur moyenne de l'énergie d'un système de deux particules placées toutes deux dans le même état de fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$, à condition de remplacer cette fonction d'onde ordinaire par un opérateur dépendant du paramètre \mathbf{r} . Ainsi, la méthode des opérateurs de création et annihilation donne l'impression d'une "seconde quantification" : on part de la fonction d'onde quantique d'une (ou deux)

particules (“première quantification”), et dans une seconde étape on remplace les coefficients des fonctions d’onde par des opérateurs (“seconde quantification”). Il faut cependant garder à l’esprit que, dans la réalité, on ne quantifie pas deux fois le même système physique ; la vraie différence tient au fait que l’on passe d’un petit nombre de particules, une ou deux, à un grand nombre de particules identiques.

Notons enfin que des opérateurs champ peuvent apparaître lorsqu’on veut quantifier un champ classique comme le champ électromagnétique. Ce sera l’objet des Chapitres XIX et XX, qui montreront comment apparaît la notion de photon, excitation élémentaire du champ électromagnétique. Nous verrons également comment les champs électrique et magnétique, qui étaient des fonctions classiques, deviennent des opérateurs définis en chaque point de l’espace créant et annihilant des photons.

COMPLÉMENTS DU CHAPITRE XVI

A_{XVI} : CORRÉLATIONS SPATIALES DANS UN GAZ PARFAIT DE BOSONS OU DE FERMIONS

Ce complément étudie les propriétés des fonctions de corrélation de la position dans des systèmes de fermions ou de bosons. Pour les premiers, on montre l'existence d'un "trou d'échange" qui traduit l'impossibilité pour deux fermions de se trouver au même point de l'espace lorsque leurs spins sont parallèles. Pour les bosons, les particules présentent un effet de groupement spatial (*bunching*). Recommandé en première lecture.

B_{XVI} : FONCTIONS DE CORRÉLATION SPATIO-TEMPORELLES, FONCTIONS DE GREEN

Les fonctions de Green constituent un outil d'usage très général en théorie des systèmes à N corps. Elles sont introduites dans ce complément, d'abord dans l'espace ordinaire, puis dans l'espace réciproque (espace de Fourier des impulsions). On montre comment la connaissance de ces fonctions permet de calculer de nombreuses propriétés physiques du système. Un peu plus difficile que le complément précédent.

C_{XVI} : THÉORÈME DE WICK

Le théorème de Wick permet d'obtenir les valeurs moyennes de produits quelconques d'opérateurs de création et d'annihilation, lorsque le système physique est un gaz parfait à l'équilibre thermique. Le calcul fait intervenir une notion très commode, celle de "contraction" d'opérateurs.

Complément A_{XVI}

Corrélations spatiales dans un gaz parfait de bosons ou de fermions

1	Système dans un état de Fock	191
	1-a Corrélations à deux points	192
	1-b Corrélations à quatre points	193
2	Fermions dans l'état fondamental	194
	2-a Corrélations à deux points	194
	2-b Corrélations entre deux particules	195
3	Bosons dans un état de Fock	198
	3-a Etat fondamental	198
	3-b Etat fragmenté	198
	3-c Autres états	199

Dans ce complément, nous établissons un certain nombre de propriétés des fonctions de corrélation dont l'origine est uniquement la statistique des particules (le fait qu'il s'agisse, soit des bosons, soit des fermions), indépendamment de leurs interactions éventuelles. Pour simplifier les calculs, nous allons supposer que le système de N particules est décrit par un état de Fock, caractérisé par des nombres d'occupation n_i de chaque état individuel $|u_i\rangle$. Nous verrons que les fermions et les bosons ont des propriétés très différentes : si les seconds manifestent une tendance au groupement, les premiers tendent plutôt à s'éviter mutuellement, comme l'indique l'existence d'un "trou d'échange".

Dans le § 1, nous donnons les expressions générales de ces fonctions de corrélation, sans aucune hypothèse particulière sur la nature des états individuels ; le système physique n'est pas nécessairement homogène dans l'espace. Dans les §§ 2 et 3, nous étudierons successivement bosons et fermions, en supposant que le système physique est contenu dans une boîte de volume \mathcal{V} à l'intérieur de laquelle les particules sont libres. Les conditions aux limites périodiques (Complément C_{XIV}) permettent alors de tenir compte de l'effet du confinement, tout en maintenant l'invariance par translation (le système est parfaitement homogène dans l'espace), ce qui facilite les calculs. Pour des particules sans spin, les états individuels $|u_i\rangle$ correspondent à des ondes planes normées dans le volume \mathcal{V} :

$$u_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \tag{1}$$

où les \mathbf{k}_i sont choisis pour satisfaire aux conditions aux limites périodiques.

1. Système dans un état de Fock

Nous supposons donc que l'état $|\Phi\rangle$ du système de N particules est un état de Fock relatif à une base $\{|u_i\rangle\}$ d'états individuels, de nombres d'occupation n_i (pour

des fermions, ils ne peuvent dépasser 1) :

$$|\Phi\rangle = |n_1 : u_1; n_2 : u_2; \dots; n_i : u_i; \dots\rangle \quad (2)$$

Ce sera le cas par exemple si les particules sont sans interaction (gaz parfait) et si le système se trouve dans un état stationnaire, par exemple son état fondamental.

1-a. Corrélations à deux points

Pour des particules sans spin, les relations (A-3) et (B-21) du Chapitre XVI conduisent à :

$$\widehat{D}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{i,j} u_i^*(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}') a_i^\dagger a_j \quad (3)$$

Mais la valeur moyenne dans un état de Fock du produit d'opérateurs $a_i^\dagger a_j$ est nulle si $i \neq j$: l'action successive des deux opérateurs conduit à un autre état de Fock, de même nombre total de particules, mais avec deux nombres d'occupation différents – donc un état orthogonal. En revanche, si $i = j$, il apparaît l'opérateur nombre de particules \widehat{n}_i dont le ket initial est un ket propre de valeur propre n_i . On a donc :

$$\langle \Phi | a_i^\dagger a_j | \Phi \rangle = \delta_{ij} n_i \quad (4)$$

(où δ_{ij} est le delta de Kronecker) ce qui donne :

$$G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \widehat{D}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rangle = \sum_i n_i u_i^*(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}') \quad (5)$$

L'interprétation physique de ce résultat est la suivante : la fonction G_1 vaudrait simplement $u_i^*(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}')$ pour une seule particule dans l'état individuel $|u_i\rangle$; pour le système de N particules dans un état de Fock, chaque état individuel contribue avec sa population pour coefficient.

Particules de spin non nul :

Pour des particules à spin, on définit les $u_i^\nu(\mathbf{r})$ par :

$$u_i^\nu(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \nu | u_i \rangle \quad (6)$$

Lorsqu'on ajoute un indice discret ν de spin à \mathbf{r} , la formule (3) devient :

$$\widehat{D}(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu') = \sum_{i,j} [u_i^\nu(\mathbf{r})]^* u_j^{\nu'}(\mathbf{r}') a_i^\dagger a_j \quad (7)$$

On obtient par le même raisonnement :

$$G_1(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu') = \langle \widehat{D}(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu') \rangle = \sum_i n_i [u_i^\nu(\mathbf{r})]^* u_i^{\nu'}(\mathbf{r}') \quad (8)$$

dont l'interprétation physique est similaire à la précédente.

On choisit souvent une base d'états individuels $|u_i\rangle$ dont chaque ket correspond à une valeur bien définie du spin : chaque i contient alors la donnée d'un état orbital individuel ainsi que d'une valeur de ν (qui devient ainsi une fonction ν_i de i). Dans ce cas, pour i donné, la fonction d'onde $u_i^\nu(\mathbf{r})$ n'est définie que pour une valeur unique

de l'indice ν ; inversement, pour ν donné, les fonctions d'onde ne sont différentes de zéro que si la valeur de l'indice i (ou j) appartient à un certain domaine $D(\nu)$. Dans l'expression (8), ν et ν' sont fixés et l'indice i doit nécessairement appartenir à la fois à $D(\nu)$ et $D(\nu')$, sinon le résultat est nul. On a donc :

$$G_1(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu') = \delta_{\nu\nu'} \sum_{i \in D(\nu)} n_i [u_i^\nu(\mathbf{r})]^* u_i^{\nu'}(\mathbf{r}') \quad (9)$$

Cette fonction de corrélation est donc nulle si $\nu' \neq \nu$.

1-b. Corrélations à quatre points

Nous nous limiterons au calcul de $\langle \widehat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \rangle$ dans le “cas diagonal” $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$ et $\mathbf{r}''' = \mathbf{r}''$; nous appelons alors \mathbf{r}_1 la valeur commune à \mathbf{r} et \mathbf{r}' , et \mathbf{r}_2 la valeur commune à \mathbf{r}'' et \mathbf{r}''' . Nous avons déjà écrit une telle fonction de corrélation diagonale en (B-20) du Chapitre XVI et au § C-5-a du Chapitre XV; nous avons constaté que c'est elle seule qui intervient dans le calcul d'une énergie d'interaction entre particules, car l'opérateur associé à cette interaction est également diagonal en représentation position.

En l'absence de spin, et pour un état de Fock, le calcul de la fonction de corrélation $G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ a été effectué au § C-5-b du Chapitre XV, où les relations (C-32) à (C-34) fournissent la valeur de cette fonction :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_i n_i (n_i - 1) |u_i(\mathbf{r}_1)|^2 |u_i(\mathbf{r}_2)|^2 + \sum_{i \neq j} n_i n_j \left[|u_i(\mathbf{r}_1)|^2 |u_j(\mathbf{r}_2)|^2 + \eta u_i^*(\mathbf{r}_1) u_i(\mathbf{r}_2) u_j^*(\mathbf{r}_2) u_j(\mathbf{r}_1) \right] \quad (10)$$

où $\eta = +1$ pour des bosons, $\eta = -1$ pour des fermions. La seconde ligne de cette équation contient un “terme direct” où seuls interviennent les carrés des modules des fonctions d'ondes; elle contient également un “terme d'échange” où la phase des fonctions d'onde intervient, et qui change de signe selon que le système est constitué de bosons ou de fermions.

Particules de spin non nul :

En présence de spins, il faut comme plus haut ajouter les indices ν correspondants. Cette fonction de corrélation devient :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \nu_1; \mathbf{r}_2, \nu_2) = \sum_i n_i (n_i - 1) |u_i^{\nu_1}(\mathbf{r}_1)|^2 |u_i^{\nu_2}(\mathbf{r}_2)|^2 + \sum_{i \neq j} n_i n_j \left[|u_i^{\nu_1}(\mathbf{r}_1)|^2 |u_j^{\nu_2}(\mathbf{r}_2)|^2 + \eta [u_i^{\nu_1}(\mathbf{r}_1)]^* u_i^{\nu_2}(\mathbf{r}_2) [u_j^{\nu_2}(\mathbf{r}_2)]^* u_j^{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \right] \quad (11)$$

Si, comme en (9), on choisit une base d'états individuels $|u_i\rangle$ dont chaque ket a une valeur bien définie du spin, la sommation se simplifie, et il vient :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \nu_1; \mathbf{r}_2, \nu_2) = \delta_{\nu_1 \nu_2} \sum_{i \in D(\nu_1)} n_i (n_i - 1) |u_i^{\nu_1}(\mathbf{r}_1)|^2 |u_i^{\nu_2}(\mathbf{r}_2)|^2 + \sum_{i \in D(\nu_1), j \in D(\nu_2); i \neq j} n_i n_j \left[|u_i^{\nu_1}(\mathbf{r}_1)|^2 |u_j^{\nu_2}(\mathbf{r}_2)|^2 + \eta \delta_{\nu_1 \nu_2} [u_i^{\nu_1}(\mathbf{r}_1)]^* u_i^{\nu_2}(\mathbf{r}_2) [u_j^{\nu_2}(\mathbf{r}_2)]^* u_j^{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \right] \quad (12)$$

Comme plus haut, $D(\nu)$ désigne le domaine auquel l'indice i doit appartenir pour que la fonction d'onde $u_i^\nu(\mathbf{r})$ existe (sinon, elle n'est pas définie). Si les états de spin

sont différents ($\nu_1 \neq \nu_2$), seul le terme de la seconde ligne (terme direct) contribue à la fonction de corrélation. Le terme d'échange qui suit ne concerne donc que des particules occupant un même état de spin ; il change de signe selon qu'elles sont des bosons ou des fermions. Il n'existe pas de terme d'échange pour des particules de spins orthogonaux. On interprète cette constatation en remarquant que, pour se comporter en objets strictement identiques, deux particules doivent occuper le même état de spin ; sinon (au moins en principe) la direction de leurs spins pourrait être utilisée pour les distinguer.

2. Fermions dans l'état fondamental

Nous considérons un gaz parfait de fermions contenu dans un volume \mathcal{V} , et supposons que leur spin S vaut $1/2$ (cas des électrons) ; l'indice ν ne peut alors prendre que deux valeurs $\pm 1/2$. Nous supposons le gaz dans l'état fondamental. Pour un gaz parfait, ceci correspond à un état de Fock : pour chacun des deux états de spin, tous les états individuels d'énergie inférieure à une certaine valeur (appelée énergie de Fermi) ont un nombre d'occupation égal à 1, tous les autres un nombre d'occupation nul. Nous procédons comme dans le Complément C_{XIV} (en particulier dans l'étude de la susceptibilité magnétique) en attribuant à chacun des deux états de spin une énergie de Fermi différente – ceci permet de tenir compte d'une orientation moyenne des spins (par exemple sous l'effet d'un champ magnétique). Pour toutes les valeurs de l'indice i correspondant à $\nu = +1/2$, nous supposons donc que les nombres d'occupation sont égaux à 1 s'ils correspondent aux ondes planes (1) de vecteur d'onde inférieur au vecteur de Fermi k_F^+ , et les autres nombres d'occupation nuls. Ce vecteur de Fermi est lié à l'énergie de Fermi associée E_F^+ par la relation :

$$E_F^+ = \frac{\hbar^2 (k_F^+)^2}{2m} \quad (13)$$

où m est la masse de chaque particule. De même, pour toutes les valeurs du spin $\nu = -1/2$, nous supposons que seuls les états de vecteur d'onde inférieurs au vecteur de Fermi k_F^- sont peuplés, avec une relation semblable à (13) dans laquelle l'indice + est remplacé par -. Les nombres totaux de particules N_{\pm} dans les deux états de spin sont alors :

$$N_{\pm} = \sum_{|\mathbf{k}_i| \leq k_F^{\pm}} 1 \quad (14)$$

(somme sur tous les états de population unité). A la limite des grands volumes \mathcal{V} , cette expression devient une intégrale :

$$N_{\pm} = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}_i| \leq k_F^{\pm}} d^3k = \frac{\mathcal{V}}{2\pi^2} \int_0^{k_F^{\pm}} k^2 dk = \frac{(k_F^{\pm})^3}{6\pi^2} \mathcal{V} \quad (15)$$

Selon que k_F^+ est plus grand ou plus petit que k_F^- , ce sont les spins + ou - qui sont majoritaires, avec égalité des populations si $k_F^+ = k_F^-$.

2-a. Corrélations à deux points

Nous calculons la valeur moyenne de l'opérateur $\widehat{D}_{(\mathbf{r},\nu; \mathbf{r}',\nu')}$ défini en (3), en distinguant les cas où ν et ν' sont égaux ou différents.

(i) Mêmes états de spin

La relation (9) donne alors, compte tenu de (1) :

$$G_1(\mathbf{r}, \pm; \mathbf{r}', \pm) = \left\langle \widehat{D}(\mathbf{r}, \pm; \mathbf{r}', \pm) \right\rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{|\mathbf{k}_i| \leq k_F^\pm} e^{i\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \quad (16)$$

où nous simplifions la notation des spins $\pm 1/2$ en \pm . A la limite des grands volumes, la somme sur \mathbf{k}_i peut être assimilée à une intégrale, et il vient :

$$G_1(\mathbf{r}, \pm; \mathbf{r}', \pm) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}_i| \leq k_F^\pm} d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \quad (17)$$

Pour $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, cette fonction redonne simplement la densité de particules N_\pm/\mathcal{V} , déjà calculée. Pour $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$, la fonction à calculer est la transformée de Fourier d'une fonction de \mathbf{k} qui ne dépend que de son module. Utilisant la relation (59) de l'appendice I du volume II, nous obtenons :

$$G_1(\mathbf{r}, \pm; \mathbf{r}', \pm) = \frac{N_\pm}{\mathcal{V}} \frac{F_\pm(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)}{F_\pm(\mathbf{0})} \quad (18)$$

avec¹ :

$$\begin{aligned} F_\pm(r) &= \frac{3}{(k_F^\pm)^3} \int_0^{k_F^\pm} k dk \sin kr = \frac{3}{(k_F^\pm)^3} \left\{ -\frac{k}{r} \cos kr + \frac{1}{r^2} \sin kr \right\}_0^{k_F^\pm} \\ &= \frac{3}{(k_F^\pm r)^3} [\sin k_F^\pm r - (k_F^\pm r) \cos k_F^\pm r] \end{aligned} \quad (19)$$

Pour finir, il vient :

$$G_1(\mathbf{r}, \pm; \mathbf{r}', \pm) = \frac{N_\pm}{\mathcal{V}} F_\pm(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \quad (20)$$

La Figure 1 représente l'allure des variations de $F_\pm(r)$ en fonction de la distance mutuelle r entre les deux points. Elle montre que, pour chaque état de spin, la fonction de corrélation "non diagonale" à une seule particule est maximale en $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, puis décroît rapidement vers zéro sur une distance de l'ordre de quelques longueurs d'onde de Fermi $\lambda_F^\pm = 2\pi/k_F^\pm$. Un système de fermions libres dans l'état fondamental ne présente donc pas un "ordre non diagonal" à longue distance.

(ii) Etats de spin opposés

Entre deux états de spin différents, la relation (9) montre que cette fonction de corrélation est nulle ; aucun ordre non diagonal n'est donc présent.

2-b. Corrélations entre deux particules

Nous utilisons la relation (12). Dans la seconde ligne, la condition $i \neq j$ peut être ignorée car les termes $i = j$ se compensent exactement avec ceux de la troisième ligne pour des fermions ; on peut donc considérer les indices i et j comme indépendants. Distinguons alors deux cas :

1. Un coefficient arbitraire $3/(k_F^\pm)^3$ a été introduit dans la fonction F pour qu'elle tende vers 1 quand sa variable tend vers zéro, ce qui permet d'éliminer $F_\pm(\mathbf{0})$.

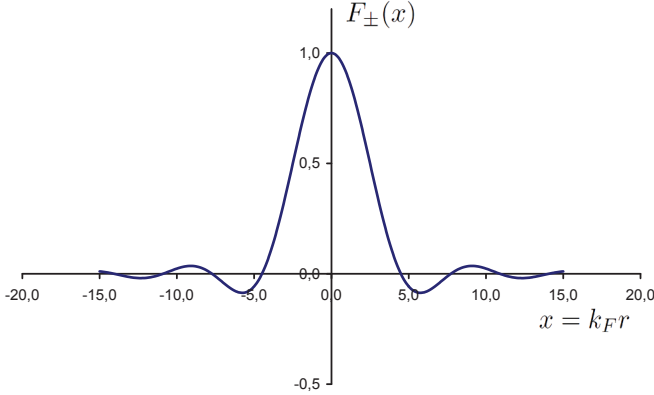


FIGURE 1 – Représentation de la fonction $F_{\pm}(x)$ en fonction de la variable sans dimension $x = k_F r$.

(i) Si $\nu_1 = \nu_2$, les trois termes de (12) subsistent, mais leurs comportements en fonction du volume \mathcal{V} sont différents. En effet, chacune des sommes sur i ou sur j est proportionnelle au volume à la limite des grands volumes, alors que les fonctions d'onde en module carré sont toutes deux proportionnelles à $1/\mathcal{V}$. Pour un grand système, le premier des trois termes ne contient qu'une somme sur i de sorte qu'il est en $1/\mathcal{V}$, et donc négligeable. Restent alors les deux autres termes :

$$\begin{aligned}
 G_2(\mathbf{r}, \pm; \mathbf{r}'', \pm) &= \left[\sum_{i \in D(\nu=\pm)} n_i |u_i^{\pm}(\mathbf{r})|^2 \right]^2 - \left| \sum_{i \in D(\nu=\pm)} n_i [u_i^{\pm}(\mathbf{r})]^* u_i^{\pm}(\mathbf{r}'') \right|^2 \\
 &= \left[\frac{N_{\pm}}{\mathcal{V}} \right]^2 - \left| \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{|\mathbf{k}_i| \leq k_F^{\pm}} e^{i\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}'' - \mathbf{r})} \right|^2 \quad (21)
 \end{aligned}$$

On voit apparaître à nouveau la somme de (17). Il vient donc à la limite des grands volumes :

$$G_2(\mathbf{r}, \pm; \mathbf{r}'', \pm) = \left[\frac{N_{\pm}}{\mathcal{V}} \right]^2 \left\{ 1 - [F_{\pm}(|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}|)]^2 \right\} \quad (22)$$

Le principe d'exclusion de Pauli interdit à des particules dans le même état de spin de se trouver au même point de l'espace ; on vérifie effectivement que l'expression (22) s'annule lorsque $\mathbf{r} = \mathbf{r}''$. Lorsque la distance entre particules augmente, la fonction $F_{\pm}(|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}|)$ tend vers zéro et la fonction de corrélation à deux corps tend vers le carré de la densité à un corps N_{\pm}/\mathcal{V} , ce qui indique la disparition des corrélations à grande distance. La distance caractéristique sur laquelle s'effectue ce changement de comportement est de l'ordre de λ_F^{\pm} , du même ordre que celle sur laquelle l'ordre non diagonal disparaît. La Figure 2 représente les variations spatiales de la fonction de corrélation ; on y voit clairement l'existence d'un "trou d'échange" traduisant l'exclusion mutuelle des particules sur cette distance caractéristique.

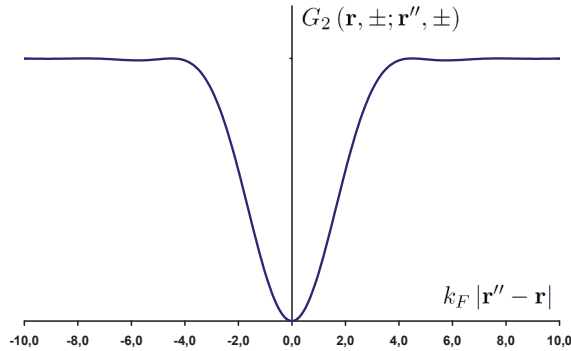


FIGURE 2 – Fonction de corrélation $G_2(\mathbf{r}, \pm; \mathbf{r}'', \pm)$ entre les positions \mathbf{r} et \mathbf{r}'' de deux particules dans un même état de spin appartenant à un gaz de fermions libres, en fonction de la variable sans dimension $k_F |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}|$. Le principe d'exclusion de Pauli interdisant aux deux particules de se trouver au même point de l'espace, cette fonction s'annule à l'origine, ce qui donne lieu à un "trou d'échange". Lorsque la distance augmente, la fonction tend vers 1 sur une distance de l'ordre de l'inverse du vecteur de Fermi associé à cet état de spin.

(ii) Si $\nu_1 \neq \nu_2$, des trois termes de (12) ne subsiste que le second, le terme direct, qui donne une constante :

$$G_2(\mathbf{r}, \pm; \mathbf{r}'', \mp) = \frac{N_+ N_-}{\mathcal{V}^2} \quad (23)$$

On trouve ainsi simplement le produit des densités des deux espèces de spin ; en l'absence d'interactions, les particules de spins différents ne présentent aucune corrélation. La raison physique est que, comme les deux particules de positions \mathbf{r} et \mathbf{r}'' sont dans des états de spin différents, elles sont en principe reconnaissables à la direction de leur spin ; elles ne se comportent donc pas comme des particules quantiques réellement indiscernables, de sorte qu'aucun effet de la statistique de Fermi ne se produit. Comme par ailleurs nous avons supposé que les particules n'ont pas d'interaction mutuelle, aucune corrélation spatiale ne se produit.

Remarque :

Pour simplifier les calculs, nous avons supposé les fermions sans interactions et le système qu'ils constituent dans son état fondamental dans une boîte cubique. Les propriétés que nous avons discutées sont cependant plus générales. En particulier, on peut montrer qu'un système de fermions présente toujours un trou d'échange pour les particules de même spin, que ces dernières interagissent ou pas ; pour un système à l'équilibre thermique, la largeur de ce trou d'échange diminue lorsque la température augmente, et passe de la longueur d'onde de Fermi à basse température (système dégénéré) à la longueur d'onde thermique à haute température (système non dégénéré).

3. Bosons dans un état de Fock

La situation est radicalement différente pour des bosons, puisque qu'aucune limite supérieure n'existe pour les nombres d'occupation n_i .

3-a. Etat fondamental

Dans l'état fondamental pour des bosons sans interaction et sans spin, le nombre d'occupation n_0 de l'état individuel $|u_0\rangle$ d'énergie la plus basse est égal au nombre total de particules N , tous les autres nombres d'occupation étant nuls. La relation (5) fournit alors :

$$G_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \langle \widehat{D}_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} \rangle = N u_0^*(\mathbf{r}) u_0(\mathbf{r}') \quad (24)$$

La fonction d'onde $u_0^*(\mathbf{r})$ s'étendant dans tout le volume \mathcal{V} , le module de cette fonction ne décroît pas lorsque la distance entre \mathbf{r} et \mathbf{r}' augmente jusqu'à devenir comparable à la taille du système, contrairement à ce que nous avons obtenu pour des fermions. Le fait que $G_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ ait ce comportement asymptotique factorisé en deux fonctions d'onde a été utilisé par Penrose et Onsager pour définir un critère général de condensation de Bose-Einstein, s'appliquant également à des systèmes de bosons en interaction.

Quant à la fonction de corrélation à deux particules, la formule (10) donne :

$$G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') = \langle \widehat{G}_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \mathbf{r}'', \mathbf{r}'')} \rangle = N(N-1) |u_0(\mathbf{r})|^2 |u_0(\mathbf{r}'')|^2 \quad (25)$$

Si la fonction d'onde de l'état fondamental est de la forme $e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} / \sqrt{\mathcal{V}}$, cette fonction est simplement égale à la constante $N(N-1)/\mathcal{V}^2$, indépendante de \mathbf{r} et \mathbf{r}' . Un ensemble de bosons qui se trouvent tous dans le même état quantique ne présente aucune corrélation spatiale.

3-b. Etat fragmenté

Supposons maintenant que le système de N bosons soit dans un état "fragmenté" : au lieu que toutes les particules soient dans le même état individuel, n_1 particules sont dans l'état $|u_1\rangle$ et n_2 dans l'état $|u_2\rangle$, avec $N = n_1 + n_2$. La relation (5) donne dans ces conditions :

$$G_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = n_1 u_1^*(\mathbf{r}) u_1(\mathbf{r}') + n_2 u_2^*(\mathbf{r}) u_2(\mathbf{r}') \quad (26)$$

Lorsque $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, les expressions (24) et (26) contiennent les modules des carrés des fonctions d'onde $u_i(\mathbf{r}')$, qui sont tous égaux à $1/\mathcal{V}$ (pour un système contenu dans une boîte de volume \mathcal{V} avec des conditions aux limites périodiques) ; les deux expressions (24) et (26) sont donc égales. Mais, lorsque \mathbf{r} et \mathbf{r}' sont différents, les phases des deux termes dans (26) ne coïncident plus, de sorte que des effets d'interférence (destructive) peuvent diminuer le module de $G_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$. Ainsi, le fait que le système physique ait été fragmenté en deux états induit une décroissance du module des termes non diagonaux de $G_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$. Bien sûr, plus le nombre d'états de fragmentation est grand, plus cette décroissance sera sensible.

La relation (10) devient maintenant :

$$G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') = n_1(n_1 - 1) |u_1(\mathbf{r})|^2 |u_1(\mathbf{r}'')|^2 + n_2(n_2 - 1) |u_2(\mathbf{r})|^2 |u_2(\mathbf{r}'')|^2 + n_1 n_2 \left[2 |u_1(\mathbf{r})|^2 |u_2(\mathbf{r}'')|^2 + u_1^*(\mathbf{r}) u_1(\mathbf{r}'') u_2^*(\mathbf{r}'') u_2(\mathbf{r}) + \text{c.c.} \right] \quad (27)$$

où le facteur 2 dans la seconde ligne vient du fait que, soit $i = 1$ et $j = 2$, soit l'inverse ; les deux derniers termes de cette expression correspondent au terme d'échange, où la notation c.c. symbolise le complexe conjugué de l'expression qui le précède. Si nous supposons que n_1 et n_2 sont très grands devant 1, et si nous remplaçons les fonctions d'onde par $e^{-i\mathbf{k}_{1,2} \cdot \mathbf{r}} / \sqrt{\mathcal{V}}$, nous faisons apparaître le carré de la somme $(n_1 + n_2)^2 = N^2$, et nous obtenons :

$$G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \simeq \frac{N^2}{\mathcal{V}^2} + 2 \frac{n_1 n_2}{\mathcal{V}^2} \cos [(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}'')] \quad (28)$$

Le premier terme est simplement le carré de la densité à une particule N/\mathcal{V} ; il n'a aucune dépendance spatiale, et correspond à ce que l'on attend en l'absence de toute corrélation entre les particules. En revanche, le terme d'échange dépend des positions ; il est maximal lorsque $\mathbf{r} = \mathbf{r}''$, et oscille à la fréquence spatiale $|\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1|$. L'effet de ce terme d'échange est d'augmenter la probabilité de trouver deux bosons proches (effet de groupement provenant de la statistique de Bose-Einstein), mais de diminuer celle de les trouver à plus grande distance, pour la faire décroître ensuite, etc. Cependant, si l'on utilise cette fonction de corrélation du gaz parfait pour calculer la valeur moyenne d'un terme d'interaction de courte portée, seul le premier maximum joue un rôle, de sorte que l'interaction augmente en valeur moyenne. Nous avons discuté au § 4-c du Complément C_{XV} les conséquences de cet effet en termes d'énergie interne d'interaction.

3-c. Autres états

Nous allons maintenant envisager des situations décrites par des états de Fock où n_0 reste très grand, mais où d'autres états $|u_i\rangle$ sont également peuplés avec des populations n_i bien plus faibles que n_0 .

(i) On peut par exemple mettre une fraction finie n_0/N des particules dans l'état fondamental, et répartir la fraction complémentaire $1 - n_0/N$ entre un grand nombre d'états dont les populations individuelles restent faibles et varient régulièrement avec l'indice i . On obtient alors :

$$G_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = n_0 u_0^*(\mathbf{r}) u_0(\mathbf{r}') + Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (29)$$

où $Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ est donné par :

$$Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{i \neq 0} n_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k_i n(\mathbf{k}_i) e^{i\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \quad (30)$$

Cette fonction est la transformée de Fourier de la distribution $n_i = n(\mathbf{k}_i)$ pour $\mathbf{k}_i \neq 0$. Tous les n_i étant positifs ou nuls, la fonction $Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ est maximale lorsque $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, puisque toutes les exponentielles $e^{i\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})}$ sont alors en phase ; elle décroît

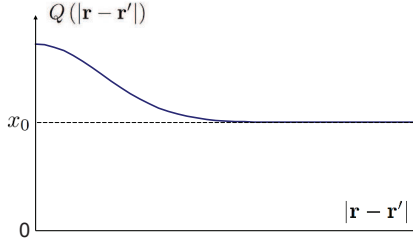


FIGURE 3 – Représentation de la fonction $G_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = x_0 + Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ pour des bosons en fonction de la distance $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Sur un intervalle de l'ordre de l'inverse de Δk , la fonction commence par décroître puis, à grande distance, tend vers une constante x_0 proportionnelle à la population de l'état fondamental. Le fait qu'elle ne tende pas vers zéro manifeste la présence d'un ordre non diagonal à grande distance, et caractérise le fait qu'un niveau individuel est fortement peuplé.

ensuite lorsque la différence $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ augmente puisque les phases se dispersent. Si la distribution des n_i est une fonction régulière de largeur Δk (par exemple une gaussienne), la fonction $Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ décroît vers zéro sur une distance $\Delta l \simeq 1/\Delta k$, en général très petite devant la taille du système.

La Figure 3 montre l'allure de la fonction $G_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ lorsque les particules sont contenues dans une boîte, ce qui permet d'utiliser (1). On a supposé que $|u_0\rangle$ correspond à l'état fondamental ; la fonction d'onde correspondante est alors simplement égale à l'inverse de la racine carrée du volume, de sorte que (29) devient :

$$G_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = x_0 + Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (31)$$

où x_0 est la densité d'atomes dans l'état fondamental :

$$x_0 = \frac{n_0}{\mathcal{V}} \quad (32)$$

Après une décroissance liée à celle de $Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, se produisant sur un intervalle $\Delta l \simeq 1/\Delta k$, la fonction ne tend pas vers zéro (comme elle le ferait pour des fermions) mais vers une valeur constante proportionnelle à la population n_0 . Comme nous l'avons déjà noté, ce comportement particulier est à la base du critère de Penrose et Onsager qui permet, de façon générale, de définir l'apparition de la condensation de Bose-Einstein et la fraction condensée par la présence d'un ordre non diagonal à grande distance.

Pour la fonction de corrélation à deux corps, la relation (10) montre l'existence de trois types de termes pour un système dont seul l'état $|u_0\rangle$ est fortement peuplé :

- les termes correspondant à deux particules dans l'état fortement peuplé

(condensat), qui proviennent de la première ligne² de (10), et donnent à nouveau (25), avec le changement de N en n_0 ;

– les termes croisés en $n_0 n_i$, qui donnent :

$$n_0 \sum_{i \neq 0} n_i \left[2 |u_i(\mathbf{r})|^2 |u_0(\mathbf{r}'')|^2 + u_0^*(\mathbf{r}) u_0(\mathbf{r}'') u_i^*(\mathbf{r}'') u_i(\mathbf{r}) + u_i^*(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}'') u_0^*(\mathbf{r}'') u_0(\mathbf{r}) \right] \quad (33)$$

Si nous reportons la valeur (1) des fonctions d'onde (en supposant $\mathbf{k}_0 = 0$), il vient une contribution à $G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ égale à :

$$\frac{n_0}{\mathcal{V}^2} \sum_{i \neq 0} n_i \left[2 + e^{i\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}'')} + e^{i\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}'' - \mathbf{r})} \right] \quad (34)$$

La relation $\sum_{i \neq 0} n_i = N - n_0$ permet d'écrire ce résultat sous la forme :

$$\frac{2n_0}{\mathcal{V}} \left[\frac{N - n_0}{\mathcal{V}} + \text{Re} [Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \right] \quad (35)$$

où Re désigne la partie réelle et Q est la fonction définie en (30) ;

– les termes correspondant à deux particules se trouvant dans les états autres que le fondamental, qui donnent :

$$\sum_{i \neq j} \frac{n_i n_j}{\mathcal{V}^2} \left[1 + e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot (\mathbf{r}'' - \mathbf{r})} \right] \quad (36)$$

Dans (34) comme dans (36), on constate que les contributions de tous les états $i \neq 0$ ont en général des phases variées, mais qu'elles sont toutes en phase lorsque $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$; la fonction de corrélation présente alors un maximum. On trouve ainsi que les bosons ont tendance à se regrouper, tendance qui se manifeste sur une distance $\Delta l \simeq 1/\Delta k$, comme s'ils s'attiraient. Toutefois, il s'agit là d'un effet de statistique pure, lié uniquement au caractère bosonique des particules, puisque nous avons supposé que les particules n'interagissaient pas.

(ii) On peut également supposer que la distribution des populations est régulière, sans privilégier aucun état individuel, cas auquel la contribution de n_0 disparaît ; seule reste la contribution des termes en $n_i n_j$ de (36), qui est maximale lorsque $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ pour les mêmes raisons que plus haut. L'allure générale de la fonction de corrélation à deux corps présente un maximum à l'origine, comme sur la Figure 3, mais tend vers zéro à grande distance (dans ce cas, $x_0 = 0$). On retrouve donc, ici aussi, une tendance au regroupement des bosons identiques.

2. A la limite des grands volumes, nous avons supposé que n_0 est la seule population proportionnelle au volume. Dans la première ligne de (10), le terme $i = 0$ contient alors le produit de n_0^2 par les carrés de deux fonctions d'onde, tous deux proportionnels à l'inverse d'un volume ; ce terme est donc indépendant du volume. En revanche, les termes $i \neq 0$ de cette seconde ligne contiennent certes une sommation sur i , qui introduit un facteur proportionnel au volume dans la limite des grands volumes, mais aussi le carré de deux fonctions d'onde, inversement proportionnels au volume. Le résultat est une contribution inversement proportionnelle au volume, donc négligeable devant la précédente.

Remarque :

Au lieu de supposer que le système de bosons est dans un état de Fock (état pur), on peut supposer qu'il se trouve à l'équilibre thermique décrit par l'équilibre thermodynamique. On retrouve alors des résultats du même type que ceux que nous venons de trouver, avec $\Delta l \simeq \lambda_T$, longueur d'onde thermique des particules [23]. La tendance au regroupement des bosons est une propriété générale.

Complément B_{XVI}

Fonctions de corrélation spatio-temporelles, fonctions de Green

1	Fonctions de Green dans l'espace ordinaire	203
1-a	Fonctions de corrélation spatio-temporelles	204
1-b	Fonctions de Green à deux et quatre points	208
1-c	Un exemple, le gaz parfait	209
2	Transformées de Fourier	212
2-a	Définition générale	212
2-b	Exemple du gaz parfait	214
2-c	Expression générale en présence d'interactions	215
2-d	Discussion	217
3	Fonction spectrale, règle de somme	218
3-a	Expression des fonctions de corrélation à une particule	218
3-b	Règle de somme	219
3-c	Expression de diverses quantités physiques	220

Nous discutons dans ce complément les propriétés des fonctions de corrélation spatio-temporelles d'un ensemble de particules identiques, généralisant les fonctions de corrélation spatiales déjà définies aux § C-5-b du Chapitre XV et § B-3 du Chapitre XVI; nous introduirons également les fonctions de Green correspondantes. Dans une première partie (§ 1), nous étudions les fonctions de corrélation spatio-temporelles normales et antinormales, puis la fonction de Green, et discutons un certain nombre de leurs propriétés, illustrées par l'exemple du gaz parfait. Puis, dans une seconde partie (§ 2), nous étudions les transformées de Fourier de ces fonctions pour des systèmes physiques invariants par translation dans l'espace et dans le temps; nous écrivons leurs expressions générales en présence d'interactions. Enfin (§ 3) nous introduisons la "fonction spectrale"; pour des particules en interaction, nous montrons comment elle conduit à des expressions très simples pour diverses grandeurs physiques, sous une forme similaire à celle utilisée pour un gaz parfait.

1. Fonctions de Green dans l'espace ordinaire

Dans le complément précédent, nous avons étudié les dépendances spatiales des fonctions de corrélation, prises à un instant donné t . Nous allons maintenant prendre en compte la dépendance temporelle dans le point de vue de Heisenberg (Complément G_{III}) où les opérateurs dépendent du temps. Pour simplifier les notations, à partir de maintenant nous supposons, soit que le spin est nul pour des bosons ($S = 0$), soit dans le cas général (fermions et bosons) que toutes les particules occupent toutes le même état de spin. Cependant, comme précédemment, la généralisation au cas où S est non nul ne demanderait que l'ajout d'un indice ν à

tous les opérateurs champ. Dans le point de vue de Heisenberg, l'opérateur champ $\Psi(\mathbf{r})$ devient un opérateur $\Psi_H(\mathbf{r}, t)$ dépendant du temps :

$$\Psi_H(\mathbf{r}, t) = e^{iHt/\hbar} \Psi(\mathbf{r}) e^{-iHt/\hbar} \quad (1)$$

où $e^{-iHt/\hbar}$ est l'opérateur d'évolution, exprimé en fonction de l'hamiltonien H du système (incluant bien sûr les interactions entre particules si elles existent), que nous supposons indépendant du temps.

Nous considérons un système de N particules identiques, fermions ou bosons, décrit par un opérateur densité ρ . Les fonctions de corrélation spatio-temporelles et fonctions de Green sont définies par les valeurs moyennes, calculées avec ρ , des produits d'un certain nombre d'opérateurs champ $\Psi_H(\mathbf{r}, t)$ et de leurs hermitiques conjugués $\Psi_H^\dagger(\mathbf{r}, t)$ pris en des points d'espace-temps $(\mathbf{r}, t), (\mathbf{r}', t'), \dots$, différents.

1-a. Fonctions de corrélation spatio-temporelles

L'opérateur densité ρ peut contenir des corrélations très complexes entre les particules, et son évolution dans le temps peut être très compliquée du fait des interactions. Nous allons cependant voir que l'on peut définir un certain nombre de fonctions qui caractérisent ses propriétés les plus simples et les plus utiles, car elles sont relatives à un petit nombre de corps seulement.

α . Fonctions normale et antinormale à deux points

On définit les fonctions de corrélation spatio-temporelles à une particule "normale" G_1^N et "antinormale" G_1^{AN} par¹ :

$$\begin{aligned} G_1^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \text{Tr} \left\{ \rho \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi_H(\mathbf{r}', t') \right\} = \left\langle \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi_H(\mathbf{r}', t') \right\rangle \\ G_1^{AN}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \text{Tr} \left\{ \rho \Psi_H(\mathbf{r}', t') \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \right\} = \left\langle \Psi_H(\mathbf{r}', t') \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \right\rangle \end{aligned} \quad (2)$$

L'ordre normal est celui où l'opérateur de création est à gauche et celui d'annihilation à droite; c'est le contraire pour l'ordre antinormal. On notera que c'est uniquement l'ordre des deux opérateurs qui change entre G_1^N et G_1^{AN} ; les variables de position et de temps affectées à chacun des deux opérateurs Ψ_H et Ψ_H^\dagger restent les mêmes.

Dans le cas particulier où $t' = t$, la fonction de corrélation normale redonne les éléments de matrice de l'opérateur densité à une particule – cf. formules (B-22) et (B-23) du Chapitre XVI. La fonction de corrélation normale est donc une généralisation de cet élément de matrice à des temps différents, dont la suite de ce complément va montrer l'utilité.

Pour comprendre le sens physique de ces deux définitions de façon intuitive, commençons par la fonction antinormale et prenons le cas simple où le système de N particules est dans un état pur $|\Phi_0\rangle$ (son état fondamental par exemple). On obtient alors :

$$\begin{aligned} G_1^{AN}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \langle \Phi_0 | \Psi_H(\mathbf{r}', t') \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}, t) | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | e^{iHt'/\hbar} \Psi(\mathbf{r}') e^{iH(t-t')/\hbar} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) e^{-iHt/\hbar} | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (3)$$

1. Pour assurer la cohérence avec les notations du Chapitre XVI (§ B), nous choisissons une notation où, dans la trace, le premier groupe de variables (\mathbf{r}, t) de la fonction G_1 est associé à l'opérateur Ψ^\dagger , le second groupe (\mathbf{r}', t') à l'opérateur Ψ . On prendra toutefois garde au fait que certains ouvrages prennent la convention contraire.

Le membre de droite se lit de la façon suivante (de droite à gauche) : on part de l'état initial $|\Phi_0\rangle$ du système, on le laisse évoluer selon son hamiltonien propre jusqu'à l'instant t , on crée ensuite une particule au point \mathbf{r} ; puis on laisse ce système de $N+1$ particules évoluer librement jusqu'à l'instant t' , et enfin on annihile une particule au point \mathbf{r}' . La fonction G_1^{AN} est alors le produit scalaire du ket ainsi obtenu avec l'état $e^{-iHt'/\hbar}|\Phi_0\rangle$ qui aurait évolué librement sur le même intervalle de temps (sans création ni annihilation de particule). En d'autres termes, la perturbation produite par la création d'une particule, suivie de sa destruction ultérieure, change l'état du système physique ; la valeur de G_1^{AN} est donnée par l'amplitude de probabilité de trouver le système dans le même état que celui qu'il aurait atteint en l'absence de cette perturbation.

L'interprétation précédente est naturelle lorsque $t' \geq t$; dans le cas contraire, la définition mathématique de G_1^{AN} reste inchangée, mais l'étape d'évolution intermédiaire devient une remontée dans le temps. Bien sûr, dans ce processus, la dynamique du système reste complète, y compris les interactions entre particules. De plus, il ne faut pas voir cette particule supplémentaire comme une particule simplement juxtaposée au système pré-existant ; elle est soumise aux effets d'indiscernabilité avec toutes les autres (nous revenons plus en détail sur ce point au § 1-a-β).

Pour la fonction normale, $\Psi_H(\mathbf{r}', t')$ agit avant $\Psi_H^\dagger(\mathbf{r}, t)$, de sorte que cette fonction s'interprète de façon naturelle si maintenant $t \geq t'$: le système évolue librement jusqu'à l'instant t' , on annihile une particule à cet instant (ce qui revient à la création d'un "trou", cf. Complément A_{XV}) ; le système de $N - 1$ particules évolue ensuite librement jusqu'à l'instant t , où la particule est créée (ce qui annihile le trou). La fonction normale devient donc l'analogue de la fonction antinormale si l'on remplace la particule additionnelle par un trou, avec en plus une inversion de l'ordre des temps.

β. Discussion physique

La définition des fonctions de corrélation contient des opérateurs de création et d'annihilation de particules, mais cela n'implique évidemment pas que de tels processus physiques se produisent réellement au sein du système considéré. Passer d'un système à N particules à un autre à $N \pm 1$ particules est une commodité mathématique, mais qui ne joue qu'un rôle intermédiaire, puisqu'au bout du compte on revient par un second opérateur au même nombre de particules. L'action d'un opérateur $\Psi(\mathbf{r})$ n'est d'ailleurs pas simplement une destruction ponctuelle d'une particule, ni celle de $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ l'apparition d'une particule au point \mathbf{r} qui se juxtaposerait simplement aux particules déjà présentes, car les effets d'indiscernabilité quantique de l'ensemble des particules (y compris la nouvelle) jouent un rôle essentiel.

Quelques exemples simples

(i) Pour la fonction de corrélation normale, la perturbation commence par l'annihilation d'une particule (création d'un trou), suivie d'une création ultérieure d'une particule (suppression d'un trou). A l'instant $t = 0$, l'opérateur d'annihilation $\Psi_H(\mathbf{r}', t)$ se développe selon la formule (A-3) du Chapitre XVI :

$$\Psi(\mathbf{r}') = \sum_i u_i(\mathbf{r}') a_i \tag{4}$$

où l'effet de chaque opérateur a_i dépend de la population n_i de l'état $|u_i\rangle$ en introduisant un facteur $\sqrt{n_i}$. Prenons un cas très simple : un gaz de bosons occupant tous le même état quantique $|u_0\rangle$ (gaz parfait de bosons totalement condensés). Agissant sur un état $|\Phi_0\rangle$ où seul l'état individuel $|u_0\rangle$ est peuplé, tous les termes de la somme (4) donnent zéro, sauf le terme $i = 0$. L'effet réel de l'opérateur $\Psi(\mathbf{r}')$ sur $|\Phi_0\rangle$ est donc la suppression d'une particule dans l'état $|u_0\rangle$; lorsque \mathbf{r}' varie, l'état obtenu reste toujours le même, simplement multiplié par un coefficient $u_0(\mathbf{r}')$. Si par exemple le gaz parfait est placé dans un piège où l'état individuel fondamental est $|u_0\rangle$, l'opérateur $\Psi(\mathbf{r}')$ n'aboutit à un ket de norme appréciable que si \mathbf{r}' tombe dans le domaine où $|u_0(\mathbf{r}')|$ n'est pas négligeable; s'il tombe hors de ce domaine, le ket obtenu est pratiquement nul. De façon générale, pour des fermions comme pour des bosons, bien évidemment $\Psi(\mathbf{r}')$ ne peut détruire de particule que dans un état individuel déjà occupé. De plus, pour des bosons, le facteur $\sqrt{n_i}$ fait que l'opérateur $\Psi(\mathbf{r}')$ donne plus de poids aux états individuels fortement peuplés qu'aux faibles nombres d'occupation. La création du trou n'est donc pas un processus ponctuel en \mathbf{r}' .

(ii) Pour la fonction de corrélation antinormale, c'est en premier la création d'une particule par l'opérateur $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ qui apparaît. Pour des bosons, à cause du facteur $\sqrt{n_i + 1}$ introduit par a_i^\dagger , $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ tend à créer préférentiellement des particules dans les états $|u_i\rangle$ de fortes populations n_i . Reprenons l'exemple ci-dessus d'un grand nombre de bosons occupant tous le même état fondamental individuel $|u_0\rangle$ dans un piège. Si $|u_0(\mathbf{r})|$ n'est pas négligeable, le boson supplémentaire est créé dans le même état fondamental. En revanche, si \mathbf{r} est très loin du centre du piège et tombe dans un domaine où $|u_0(\mathbf{r})|$ est pratiquement nul, le boson est effectivement créé au point \mathbf{r} avec très peu de perturbation des bosons déjà présents.

Pour des fermions, il est au contraire impossible de créer une particule dans un état déjà occupé; dans un état de Fock, un fermion supplémentaire ne peut être créé que dans un état orthogonal à tous les états qui sont initialement peuplés. Supposons le gaz de fermions parfait dans son état fondamental et contenu dans un piège harmonique; tous les niveaux d'énergie sont donc occupés jusqu'à l'énergie de Fermi. L'effet de l'opérateur de création $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ en un point proche du centre du piège crée une particule supplémentaire dans un état qui peut se développer sur tous les états stationnaires individuels dans le piège; l'état obtenu étant orthogonal à tous les états déjà occupés, il n'a de composante que sur les états non occupés, d'énergies supérieures au niveau de Fermi. Or les fonctions d'onde correspondantes prennent de petites valeurs au centre du piège et sont maximales dans les régions de demi-tour classique², c'est-à-dire en l'occurrence sur le pourtour du nuage de fermions existant (ou même plus loin). Si la position \mathbf{r} est proche du centre du piège, le fermion additionnel s'ajoute donc sur la périphérie ou à l'extérieur du nuage de fermions. En revanche, si \mathbf{r} tombe à l'extérieur, dans une région de l'espace où toutes les fonctions d'onde des états occupés sont pratiquement nulles, la particule supplémentaire est effectivement créée de façon quasi ponctuelle au point \mathbf{r} . Nous verrons des exemples de ces diverses situations au § 1-c.

2. Le carré du module de la fonction d'onde d'un état stationnaire donne en chaque point la densité de probabilité de présence pour cet état. Cette probabilité est maximale dans les régions de l'espace où, classiquement, la particule passe le plus de temps; ce sont donc celles où sa vitesse est faible, comme c'est le cas pour les régions de demi-tour classique. La Figure 6 du Chapitre V donne un exemple d'une telle situation.

$\gamma.$ *Propriétés*

Le complexe conjugué de G_1^N s'obtient en changeant l'ordre des opérateurs de champ dans (2) et en les remplaçant par leurs hermitiques conjugués :

$$[G_1^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')]^* = \left\langle \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}', t') \Psi_H(\mathbf{r}, t) \right\rangle = G_1^N(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t) \quad (5)$$

La conjugaison complexe de la fonction G_1^N est donc équivalente à l'échange des deux points (\mathbf{r}, t) et (\mathbf{r}', t') , c'est-à-dire à une opération de parité effectuée sur les variables $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ et $t - t'$. Une propriété semblable se démontre aisément pour G_1^{AN} . Il en découle que les transformées de Fourier de ces fonctions par rapport aux variables $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ et $t - t'$ sont réelles. De plus, lorsque le système est dans un état invariant par translation dans l'espace et dans le temps³, les fonctions de corrélation ne dépendent que des différences $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ et $t - t'$.

On remarque que la combinaison linéaire $G_1^{AN}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') - \eta G_1^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ fait apparaître la valeur moyenne de l'opérateur :

$$\left[\Psi_H(\mathbf{r}', t'), \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \right]_{-\eta} \quad (6)$$

où $\eta = +1$ pour des bosons, $\eta = -1$ pour des fermions. Si $t = t'$, compte tenu de la relation (A-19) du Chapitre XVI cette égalité devient :

$$G_1^{AN}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t) - \eta G_1^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t) = \text{Tr} \{ \rho \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (7)$$

$\delta.$ *Evolution temporelle, fonctions à quatre points*

Reportons dans la définition (2) de G_1^N l'hermitique conjuguée de l'équation d'évolution de $\Psi_H(\mathbf{r}, t)$, écrite en (C-13) au Chapitre XVI; nous obtenons :

$$\begin{aligned} & \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} - V_1(\mathbf{r}) \right] G_1^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \\ &= \int d^3 r'' W_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \left\langle \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}; t) \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}''; t) \Psi_H(\mathbf{r}''; t) \Psi_H(\mathbf{r}'; t') \right\rangle \\ &= \int d^3 r'' W_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') G_2^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t; \mathbf{r}'', t; \mathbf{r}'', t) \end{aligned} \quad (8)$$

où apparaît la fonction de corrélation normale à deux particules (ou à quatre points) qui s'écrit, de façon plus générale :

$$G_2^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t'; \mathbf{r}'', t''; \mathbf{r}''', t''') = \text{Tr} \left\{ \rho \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'', t'') \Psi_H(\mathbf{r}''', t''') \Psi_H(\mathbf{r}', t') \right\} \quad (9)$$

La prise en compte d'une dépendance temporelle généralise la formule (B-30) du Chapitre XVI (plus précisément, sa valeur moyenne). L'équation donnant la variation de G_1^N par rapport aux variables \mathbf{r}' et t' , ou encore celle donnant l'évolution de la fonction antinormale G_1^{AN} , s'obtiennent de façon similaire. Les quatre groupes de

3. C'est le cas si l'hamiltonien du système physique est invariant par translation et si le système est dans un état propre de H , ou décrit par un opérateur densité ρ qui est une fonction de H .

variables temps-position dont dépend la fonction G_2^N sont en général indépendantes. Cependant, on n'a souvent besoin que de la "partie diagonale" $G_2^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}'', t'')$ de la fonction de corrélation, obtenue si $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$, $t' = t$ et $\mathbf{r}''' = \mathbf{r}''$, $t''' = t''$; cette partie diagonale est analogue à la fonction de corrélation à deux particules (deux positions, deux temps) en mécanique statistique classique. Lorsque le système est invariant par translation dans l'espace et dans le temps, cette fonction ne dépend que des différences $\mathbf{r} - \mathbf{r}''$ et $t - t''$.

Alors que, pour la fonction G_1^N , un trou est créé puis détruit, pour G_2^N ce sont deux trous qui sont créés puis détruits, l'ordre naturel des temps croissants étant donné par les variables de temps des opérateurs pris de droite à gauche dans (9). On définirait de façon analogue une fonction G_2^{AN} où l'on commence par créer deux particules pour les détruire à des instants ultérieurs (on intervertit le rôle des particules et des trous par rapport à la fonction de corrélation normale). Lorsque les particules interagissent, l'équation d'évolution de G_1^N fait donc intervenir une autre fonction de corrélation d'ordre plus élevé, G_2^N . A son tour, l'évolution de G_2^N fait intervenir des fonctions de corrélation d'ordre encore plus élevé G_3^N , etc. Ainsi, du fait des interactions, le système d'équations n'est pas "fermé", mais comprend une "hiérarchie" complète d'un très grand nombre d'équations portant sur des corrélations d'ordre de plus en plus élevé.

1-b. Fonctions de Green à deux et quatre points

L'équation (8) est une équation aux dérivées partielles linéaire, avec un second membre qu'on appelle parfois "terme source". Dans le cas présent, ce second membre ne contient pas de fonction singulière. Mais, lorsque le second membre est modifié par l'inclusion d'une fonction delta, les nouvelles solutions de l'équation sont appelées "fonctions de Green" \mathcal{G} . Nous allons voir comment introduire des fonctions de Green dans le problème qui nous intéresse.

α. Fonction de Green à deux points

La fonction de Green à deux points \mathcal{G}_1 s'obtient en combinant les deux fonctions de corrélation du § 1-a. Nous avons vu au § 1-a que, lorsque $t' > t$, la fonction de corrélation antinormale est la plus naturelle, car elle contient la propagation d'une particule de t à t' . En revanche, pour $t' < t$, c'est plutôt la fonction normale, qui contient la propagation d'un trou de t' à t . Nous pouvons condenser ces deux possibilités en une seule en posant :

$$\mathcal{G}_1(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = Y(t' - t) G_1^{AN}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') + \eta Y(t - t') G_1^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \quad (10)$$

où $Y(t' - t)$ est la fonction de Heaviside de la variable $t' - t$ (égale à 1 si $t' - t > 0$, nulle sinon), et où η vaut +1 pour des bosons, -1 pour des fermions; nous verrons plus loin, par exemple au § 1-c- γ , que l'introduction de ce facteur η simplifie les calculs qui vont suivre.

Lorsqu'on dérive la fonction de Green à deux points \mathcal{G}_1 par rapport au temps, les discontinuités introduites par les fonctions de Heaviside font apparaître des fonctions delta; le calcul précis sera fait au § 1-c- γ pour un gaz parfait et nous permettra de vérifier que \mathcal{G}_1 est bien une fonction de Green. Utiliser ce type de fonction s'avère commode dans un certain nombre de calculs, notamment ceux qui mettent en jeu la transformée de Fourier, ainsi que les calculs de perturbations.

β . *Fonction de Green à quatre points*

Par analogie avec (9), on définit une fonction de Green à deux particules (ou à 4 points) par :

$$\mathcal{G}_2(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t'; \mathbf{r}'', t''; \mathbf{r}''', t''') = \text{Tr} \left\{ \rho T \Psi_H(\mathbf{r}', t') \Psi_H(\mathbf{r}''', t''') \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}'', t'') \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \right\} \quad (11)$$

où l'opérateur T représente un opérateur de mise en ordre des 4 temps par valeurs décroissantes de gauche à droite (par définition, cet opérateur T inclut également un facteur η^P , où P est la parité de la permutation nécessaire à cette remise en ordre des temps ; ceci peut changer le signe pour des fermions).

1-c. Un exemple, le gaz parfait

Si le système étudié est un gaz parfait, il est possible d'obtenir les valeurs explicites des fonctions précédentes. Comme plus haut, nous supposons le gaz placé dans une boîte de volume \mathcal{V} et soumis à des conditions aux limites périodiques. Appliquant la relation (A-3) du Chapitre XVI au cas où les $u_i(\mathbf{r})$ sont des ondes planes, nous pouvons écrire l'opérateur champ $\Psi(\mathbf{r})$ sous la forme :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_i \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{\mathcal{V}}} a_{\mathbf{k}_i} \quad (12)$$

où la somme est effectuée sur les vecteurs d'onde \mathbf{k}_i satisfaisant aux conditions aux limites périodiques. Cette décomposition est commode car, pour un gaz parfait, la dépendance temporelle des opérateurs en point de vue de Heisenberg $a_{\mathbf{k}}^H$ est particulièrement simple. En effet, l'hamiltonien s'écrit alors :

$$H = \sum_j \hbar \omega_{\mathbf{k}_j} \left(a_{\mathbf{k}_j}^\dagger a_{\mathbf{k}_j} \right) \quad (13)$$

avec :

$$\omega_{\mathbf{k}_j} = \frac{\hbar (\mathbf{k}_j)^2}{2m} \quad (14)$$

Compte tenu du fait que l'opérateur $\left(a_{\mathbf{k}_j}^\dagger a_{\mathbf{k}_j} \right)$ commute avec tout opérateur de destruction $a_{\mathbf{k}_i}$ relatif à une impulsion différente⁴, mais que $\left[a_{\mathbf{k}_i}, a_{\mathbf{k}_i}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} \right] = a_{\mathbf{k}_i}$, il vient :

$$\left[a_{\mathbf{k}_i}, H \right] = \hbar \omega_{\mathbf{k}_i} a_{\mathbf{k}_i} \quad (15)$$

Ceci correspond à une évolution en point de vue de Heisenberg selon :

$$a_{\mathbf{k}_i}^H(t) = e^{-i\omega_{\mathbf{k}_i} t} a_{\mathbf{k}_i} \quad (16)$$

4. Pour des fermions, deux signes moins s'introduisent du fait des anticommutations, et ces signes se compensent. Si les impulsions sont les mêmes, on a $a_{\mathbf{k}_i} a_{\mathbf{k}_i}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} = -a_{\mathbf{k}_i}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} a_{\mathbf{k}_i} + a_{\mathbf{k}_i} = 0 + a_{\mathbf{k}_i}$ et $a_{\mathbf{k}_i}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} a_{\mathbf{k}_i} = 0$, de sorte que $\left[a_{\mathbf{k}_i}, a_{\mathbf{k}_i}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} \right] = a_{\mathbf{k}_i}$.

L'évolution temporelle de $\Psi_H(\mathbf{r}, t)$ est donc donnée par :

$$\Psi_H(\mathbf{r}, t) = \sum_i \frac{e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}_i} t)}}{\sqrt{\mathcal{V}}} a_{\mathbf{k}_i} \quad (17)$$

$\alpha.$ *Fonction de corrélation normale*

Reportant ce résultat dans (2), nous obtenons :

$$G_1^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \sum_{i,j} \frac{e^{-i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}_j} t)} e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}' - \omega_{\mathbf{k}_i} t')}}{\mathcal{V}} \langle a_{\mathbf{k}_j}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} \rangle \quad (18)$$

Mais l'invariance par translation impose que la valeur moyenne $\langle a_{\mathbf{k}_j}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} \rangle$ est nulle dès que $\mathbf{k}_j \neq \mathbf{k}_i$. En effet, supposons par exemple que l'opérateur densité du système soit l'opérateur d'équilibre thermique canonique $\rho_{eq.} = e^{-\beta H} / Z$; cet opérateur est diagonal dans la base des états de Fock, de sorte que la trace du produit $\rho a_{\mathbf{k}_j}^\dagger a_{\mathbf{k}_i}$ est nulle si l'opérateur de destruction et celui de création n'agissent pas sur le même état individuel. La non-nullité demande que $\mathbf{k}_j = \mathbf{k}_i$. De même, si c'est l'équilibre grand canonique $\rho_{eq.} = e^{-\beta(H - \mu N)} / Z$ qui est utilisé, l'opérateur ρ est toujours diagonal dans la même base, et la même règle subsiste. De façon générale, on peut voir⁵ que l'invariance par translation de ρ impose que :

$$\langle a_{\mathbf{k}_j}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} \rangle = \text{Tr} \left\{ \rho a_{\mathbf{k}_j}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} \right\} = \delta_{ij} \times n_i \quad (19)$$

où n_i est la valeur moyenne de l'opérateur population \hat{n}_i :

$$n_i = \langle \hat{n}_i \rangle \quad (20)$$

Donc :

$$G_1^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_i n_i e^{i[\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) - \omega_{\mathbf{k}_i} (t' - t)]} \quad (21)$$

Ainsi, la fonction de corrélation normale est simplement la somme de toutes les contributions des états individuels peuplés par des particules libres, repérés par l'indice \mathbf{k}_i ; chacun de ces états contribue de façon proportionnelle à sa population moyenne n_i , et apporte une dépendance spatio-temporelle donnée par l'onde progressive $e^{i[\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) - \omega_{\mathbf{k}_i} (t' - t)]}$ qui lui est associée.

Comme on peut s'y attendre pour un système invariant par translation (dans l'espace et le temps), cette fonction normale ne dépend que des différences $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ et $t - t'$. Compte tenu de (14), elle obéit à l'équation aux dérivées partielles :

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t'} + \frac{\hbar}{2m} \Delta_{\mathbf{r}'} \right] G_1^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0 \quad (22)$$

5. Une façon générale de le démontrer est de remarquer que l'opérateur $a_{\mathbf{k}_j}^\dagger a_{\mathbf{k}_i}$ n'est invariant par translation que si $\mathbf{k}_j = \mathbf{k}_i$. Pour cela, on peut utiliser l'expression de l'opérateur de translation comme exponentielle de l'opérateur associé à l'impulsion totale (Complément E_{II}, § 3).

qui correspond à la propagation libre des particules dans un gaz parfait (il existe une équation semblable pour les variables t et \mathbf{r} , avec changement de signe du terme différentiel en temps).

L'expression (21) permet de revenir sur l'interprétation physique de la fonction de corrélation normale du § 1-a, en termes de création dans le système de N particules d'un "trou", qui se propage ensuite pour être annihilé à un instant ultérieur. Pour un gaz parfait, chacun des termes de la somme de (21) est constitué d'ondes planes libres : l'absence d'interactions permet aux particules de se propager librement en ligne droite. Le n_i de cette formule montre également que le trou ne peut se propager que selon les états individuels déjà peuplés dans le système de N particules : il faut bien qu'un état quantique soit peuplé pour qu'on puisse y créer un trou, comme nous l'avons souligné au § 1-a- β . Il en découle que le trou créé n'est pas un objet ponctuel réellement localisé au point \mathbf{r}' : il ne comprend que des superpositions des états libres peuplés, alors que pour une excitation réellement ponctuelle il faudrait combiner des valeurs de \mathbf{k}_i allant jusqu'à l'infini.

β . Fonction de corrélation antinormale

Pour la fonction antinormale $G_1^{AN}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$, le calcul est pratiquement le même, la seule différence étant l'inversion de l'ordre des opérateurs $a_{\mathbf{k}}$ et $a_{\mathbf{k}}^\dagger$, ce qui conduit à :

$$G_1^{AN}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_i [1 + \eta n_i] e^{i[\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) - \omega_{\mathbf{k}_i} (t' - t)]} \quad (23)$$

Elle obéit à la même équation aux dérivées partielles que la fonction normale. Il découle de (21) et (23) que la combinaison linéaire :

$$G_1^{AN}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') - \eta G_1^N(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_i e^{i[\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) - \omega_{\mathbf{k}_i} (t' - t)]} \quad (24)$$

est indépendante de l'état du système ; si $t = t'$, elle est simplement égale à la fonction $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Nous verrons plus bas le lien entre cette expression et la définition plus générale de la fonction spectrale.

Ici aussi, nous pouvons revenir sur la discussion du § 1-a- β pour interpréter l'effet de l'opérateur $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$. Pour un système de fermions ($\eta = -1$), la relation (23) montre bien que la création de la particule ne met en jeu aucun des états individuels \mathbf{k}_i déjà occupés avec $n_i = 1$, puisque le terme correspondant est nul. L'objet créé par l'excitation ne peut donc avoir aucune composante sur ces états individuels déjà peuplés, ce qui traduit simplement le fait que sa fonction d'onde doit rester orthogonale à celles de tous les fermions déjà présents. Pour un système de bosons, l'effet est juste l'opposé : si par exemple un état individuel de bosons possède une population très élevée par rapport à toutes les autres, la présence d'un n_i très grand dans (23) fait que le terme correspondant sera dominant : la particule additionnelle se trouvera principalement dans le même état individuel que toutes celles à laquelle elle s'ajoute.

γ . *Fonction de Green à deux points*

La fonction de Green $\mathcal{G}_1(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ est obtenue à partir de sa définition (10) :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_1(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_i e^{i[\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) - \omega_{\mathbf{k}_i}(t' - t)]} \{Y(t' - t) [1 + \eta n_i] + \eta Y(t - t') n_i\} \end{aligned} \quad (25)$$

Si l'on dérive par rapport au temps t' , les deux fonctions de Heaviside introduisent des fonctions delta avec des signes opposés. On est alors conduit à l'équation aux dérivées partielles :

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t'} + \frac{\hbar}{2m} \Delta_{\mathbf{r}'} \right] \mathcal{G}_1(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{i \delta(t - t')}{\mathcal{V}} \sum_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} [1 + \eta n_i - \eta n_i] \quad (26)$$

soit :

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t'} + \frac{\hbar}{2m} \Delta_{\mathbf{r}'} \right] \mathcal{G}_1(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = i \delta(t - t') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \quad (27)$$

Le second membre redonne bien le produit de fonctions delta de l'ensemble des variables caractérisant une fonction de Green.

En présence d'interactions, cette équation aux dérivées partielles n'est plus valable ; il faut ajouter au second membre les contributions des interactions, qui font intervenir des fonctions de Green d'ordre plus élevé.

δ . *Fonctions à quatre points*

Pour les fonctions de corrélation à quatre points, le calcul est semblable au précédent ; il suffit d'effectuer à nouveau la substitution (17) pour obtenir leurs expressions explicites pour un gaz parfait contenu dans une boîte. Les résultats sont les mêmes que ceux obtenus au Complément A_{XVI}, par exemple dans la relation (21), à ceci près qu'il faut multiplier chaque onde plane spatiale $e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}$ par le facteur d'évolution temporelle associé $e^{-i\omega_{\mathbf{k}_i} t}$.

2. Transformées de Fourier

À partir de maintenant, nous étudions uniquement des systèmes invariants par translation dans l'espace et le temps. Toute la dépendance vis-à-vis de ces variables est alors contenue dans les différences $\mathbf{r}' - \mathbf{r}$ et $t' - t$, et reste donc préservée si l'on annule \mathbf{r} et t .

2-a. Définition générale

On peut introduire les deux (doubles) transformées de Fourier par rapport au temps et à l'espace par :

$$\boxed{\bar{G}_1^{N,AN}(\mathbf{k}, \omega) = \int d^3 r' \int dt' e^{i(\omega t' - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}')} G_1^{N,AN}(0, 0; \mathbf{r}', t')} \quad (28)$$

(on pose $\mathbf{r} = 0$ et $t = 0$ dans la fonction $G_1^{N,AN}$). Ces fonctions sont réelles, comme le montre la relation de parité (5).

La transformée de Fourier $\bar{\mathcal{G}}_1$ de la fonction de Green \mathcal{G}_1 introduite en (10) est appelée “propagateur à une particule”; ce dernier est défini par :

$$\boxed{\bar{\mathcal{G}}_1(\mathbf{k}, \omega) = \int d^3r' \int dt' e^{i(\omega t' - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}')} \mathcal{G}_1(0, 0; \mathbf{r}', t')} \quad (29)$$

Pour un système contenu dans un volume \mathcal{V} et soumis aux conditions aux limites périodiques (Complément F_{XI}), les intégrales sur d^3r' des formules ci-dessus ont \mathcal{V} pour volume d'intégration. Elles donnent alors les coefficients d'une série de Fourier où les vecteurs \mathbf{k} prennent les valeurs discrètes \mathbf{k}_i correspondant aux conditions aux limites. Cette série caractérise la dépendance spatiale. En ce qui concerne la dépendance temporelle, la transformée de Fourier est une transformée continue⁶. Les relations de transformation inverses s'expriment alors selon :

$$G_1^{N,AN}(0, 0; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}_i} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}' - \omega t')} \bar{G}_1^{N,AN}(\mathbf{k}_i, \omega) \quad (30)$$

où, à la limite des très grands volumes, la somme discrète sur \mathbf{k}_i devient une intégrale avec un coefficient $\mathcal{V}/(2\pi)^3$:

$$G_1^{N,AN}(0, 0; \mathbf{r}', t') = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' - \omega t')} \bar{G}_1^{N,AN}(\mathbf{k}, \omega) \quad (31)$$

Remarque :

On peut également exprimer les fonctions $\bar{G}_1^{N,AN}(k, \omega)$, non pas par des transformées de Fourier comme en (28), mais directement à partir des valeurs moyennes de produit d'opérateurs de création $a_{\mathbf{k}_j}^\dagger$ et d'annihilation $a_{\mathbf{k}_j}$ dans des états individuels $|\mathbf{k}\rangle$. Les formules (A-3) et (A-6) du Chapitre XVI indiquent en effet que :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} a_{\mathbf{k}_j} \quad \text{et} \quad \Psi^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{j'} e^{-i\mathbf{k}_{j'} \cdot \mathbf{r}} a_{\mathbf{k}_{j'}}^\dagger \quad (32)$$

Si l'on reporte ces relations dans les définitions (2), puis dans (28), on obtient :

$$\bar{G}_1^N(\mathbf{k}_i, \omega) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r' \int dt' e^{i(\omega t' - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}')} \sum_{j, j'} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}'} \langle a_{\mathbf{k}_{j'}}^\dagger a_{\mathbf{k}_j}^H(t') \rangle \quad (33)$$

où $a_{\mathbf{k}_j}^H(t')$ désigne l'opérateur $a_{\mathbf{k}_j}$ en point de vue de Heisenberg. L'intégration sur le volume sélectionne le seul terme $j = i$ et fait disparaître le volume \mathcal{V} . D'autre part, l'invariance par translation fait que, ni l'opérateur densité ρ , ni l'hamiltonien du système, n'ont d'éléments de matrice entre vecteurs d'état d'impulsion totale différente, alors que l'opérateur $a_{\mathbf{k}_{j'}}^\dagger$ augmente cette impulsion totale de $\hbar k_{j'}$ et $a_{\mathbf{k}_j}^H(t')$ la diminue de $\hbar k_j$. La valeur moyenne $\langle a_{\mathbf{k}_{j'}}^\dagger a_{\mathbf{k}_j}^H(t') \rangle$ est donc nulle si j' n'est pas égal à j , de sorte que la somme sur j' disparaît également. Pour finir :

$$\bar{G}_1^N(\mathbf{k}_i, \omega) = \int dt' e^{i\omega t'} \langle a_{\mathbf{k}_i}^\dagger a_{\mathbf{k}_i}^H(t') \rangle \quad (34)$$

6. Contrairement aux variables d'espace, la variable de temps n'est pas confinée à un domaine de variation fini. Il en découle que les transformées de Fourier par rapport au temps peuvent être singulières; dans le cas du gaz parfait, nous en verrons un exemple au § 2-b, avec l'introduction de facteurs de convergence par une exponentielle décroissante $e^{\pm \varepsilon t}$ (où ε tend vers zéro par valeurs positives).

De même, on trouverait que :

$$\bar{G}_1^{AN}(\mathbf{k}_i, \omega) = \int dt' e^{i\omega t'} \langle a_{\mathbf{k}_i}^H(t') a_{\mathbf{k}_i}^\dagger \rangle \quad (35)$$

2-b. Exemple du gaz parfait

Pour un gaz parfait contenu dans une boîte (avec des conditions aux limites périodiques), les \mathbf{k} sont discrets. Si nous remplaçons \mathbf{k} par \mathbf{k}_i dans (28) et reportons l'expression (21) en y remplaçant l'indice muet \mathbf{k}_i par \mathbf{k}_j , nous obtenons un produit d'exponentielles à intégrer. L'intégrale sur d^3r' , combinée avec le facteur $1/\mathcal{V}$, introduit un delta de Kronecker $\delta_{\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_i}$ qui supprime la somme sur \mathbf{k}_j ; celle sur dt' introduit $2\pi\delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}_i})$, de sorte que :

$$\bar{G}_1^N(\mathbf{k}_i, \omega) = 2\pi n_i \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}_i}) \quad (36)$$

De même :

$$\bar{G}_1^{AN}(\mathbf{k}_i, \omega) = 2\pi [1 + \eta n_i] \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}_i}) \quad (37)$$

En conséquence :

$$\bar{G}_1^{AN}(\mathbf{k}_i, \omega) - \eta \bar{G}_1^N(\mathbf{k}_i, \omega) = 2\pi\delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}_i}) \quad (38)$$

Ces expressions sont particulièrement simples, mais ne restent bien sûr plus valables si les particules interagissent. Elles fournissent cependant un point de comparaison utile pour comprendre l'effet des interactions.

Le propagateur à une particule $\bar{G}_1(\mathbf{k}, \omega)$ défini en (29) s'obtient par la même méthode; l'intégrale sur d^3r' reste inchangée, mais l'intégrale sur le temps introduit maintenant :

$$\int dt' e^{i(\omega - \omega_{\mathbf{k}_i})t'} \{Y(t') [1 + \eta n_i] + \eta Y(-t') n_i\} \quad (39)$$

Pour le terme en $Y(t')$ on introduit, selon une méthode classique, un facteur de convergence en changeant ω en $\omega + i\varepsilon$, avec $\varepsilon \rightarrow 0$ par valeurs positives; pour le terme en $Y(-t')$, c'est un changement en $\omega - i\varepsilon$. On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \bar{G}_1(\mathbf{k}_i, \omega) &= -\frac{1 + \eta n_i}{i[\omega - \omega_{\mathbf{k}_i} + i\varepsilon]} + \frac{\eta n_i}{i[\omega - \omega_{\mathbf{k}_i} - i\varepsilon]} \\ &= \frac{i}{[\omega - \omega_{\mathbf{k}_i} + i\varepsilon]} + \eta n_i \frac{2\varepsilon}{[\omega - \omega_{\mathbf{k}_i}]^2 + \varepsilon^2} \end{aligned} \quad (40)$$

A la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, les deux fractions du second membre introduisent des parties principales et des fonctions delta – cf. relation (12) de l'Appendice II. Le premier terme du second membre introduit à la fois une partie principale $\mathcal{P}[1/(\omega - \omega_{\mathbf{k}_i})]$ et une fonction $\delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}_i})$, tandis que le second (en ηn_i) introduit uniquement une fonction $\delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}_i})$. Si le système est dilué, il est dans le régime classique (non dégénéré) où tous les nombres d'occupation sont petits devant 1 et où les effets d'échange sont faibles; le second terme, qui traduit les effets de l'indiscernabilité entre les particules, reste alors négligeable.

2-c. Expression générale en présence d'interactions

Un système invariant par translation est régi par un hamiltonien H qui commute avec son impulsion totale. On peut alors construire une base de vecteurs d'états qui sont, pour chaque nombre N de particules et pour chaque valeur $\hbar\mathbf{K}$ de l'impulsion totale, des vecteurs propres de H d'énergies E ; nous noterons également $E_{N,\mathbf{K}}$ ces énergies, car il est souvent utile de garder la trace explicite des valeurs de N et \mathbf{K} qui définissent le sous-espace où est obtenue la valeur propre E dans le spectre de H . Nous appelons $|\Phi_{E,\mathbf{K},\alpha}^N\rangle$ les vecteurs propres correspondants, avec un indice α pour tenir compte des dégénérescences possibles de ces valeurs propres.

Nous supposons l'état du système stationnaire et invariant par translation, de sorte que son opérateur densité ρ ne peut avoir d'éléments non diagonaux entre vecteurs propres d'impulsions ou d'énergies différentes; dans chaque sous-espace propre commun à ces deux grandeurs, on peut choisir la base $|\Phi_{E,\mathbf{K},\alpha}^N\rangle$ qui diagonalise l'opérateur densité, et poser :

$$\rho_{E,\mathbf{K},\alpha}^N = \langle \Phi_{E,\mathbf{K},\alpha}^N | \rho | \Phi_{E,\mathbf{K},\alpha}^N \rangle \quad (41)$$

Nous allons utiliser cette base pour calculer la trace de (2). Commençons par insérer l'expression (12) des opérateurs de champ (et leurs conjugués) en fonction des opérateurs $a_{\mathbf{k}_i}$; nous obtenons, compte tenu des exponentielles du temps introduites par les opérateurs en point de vue de Heisenberg :

$$G_1^N(0, 0; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_i \sum_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}'} \sum_{N,\mathbf{K},E,\alpha} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}'} \sum_{N',\mathbf{K}',E',\alpha'} \rho_{E,\mathbf{K},\alpha}^N \times \langle \Phi_{E,\mathbf{K},\alpha}^N | a_{\mathbf{k}_i}^\dagger | \Phi_{E',\mathbf{K}',\alpha'}^{N'} \rangle \langle \Phi_{E',\mathbf{K}',\alpha'}^{N'} | a_{\mathbf{k}_j} | \Phi_{E,\mathbf{K},\alpha}^N \rangle e^{i[E_{N',\mathbf{K}'}^{N'} - E_{N,\mathbf{K}}]t'/\hbar} \quad (42)$$

Plusieurs simplifications se produisent dans le second membre de cette égalité. En premier lieu, comme l'opérateur $a_{\mathbf{k}_j}$ détruit une particule, on a nécessairement $N' = N - 1$, sinon l'élément de matrice de $a_{\mathbf{k}_j}$ serait nul; la somme sur N' disparaît donc. De même, comme cet opérateur diminue l'impulsion totale de $\hbar\mathbf{k}_j$, on a également $\mathbf{K}' = \mathbf{K} - \mathbf{k}_j$, et la somme sur \mathbf{K}' disparaît également. Alors, pour que l'élément de matrice de $a_{\mathbf{k}_i}^\dagger$ ne soit pas nul, puisque cet opérateur augmente de $\hbar\mathbf{k}_i$ l'impulsion $\hbar(\mathbf{K} - \mathbf{k}_j)$ et redonne finalement l'impulsion de départ $\hbar\mathbf{K}$, on a nécessairement $\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_j$. Une fois ces simplifications effectuées, insérons le résultat dans la définition (28) de $\bar{G}_1^N(\mathbf{k}, \omega)$; nous obtenons :

$$\bar{G}_1^N(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r' \int dt' e^{i(\omega t' - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}')} \sum_j e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}'} \sum_{N,\mathbf{K}} \sum_{E,E',\alpha,\alpha'} \rho_{E,\mathbf{K},\alpha}^N \left| \langle \Phi_{E,\mathbf{K},\alpha}^N | a_{\mathbf{k}_i}^\dagger | \Phi_{E',\mathbf{K}-\mathbf{k},\alpha'}^{N-1} \rangle \right|^2 e^{i[E_{N-1,\mathbf{K}-\mathbf{k}}^{N-1} - E_{N,\mathbf{K}}]t'/\hbar} \quad (43)$$

Dans la première ligne, l'intégrale sur d^3r' introduit un delta de Kronecker qui impose $\mathbf{k}_j = \mathbf{k}$; l'intégrale donne alors \mathcal{V} , qui compense le volume au dénominateur. L'intégrale sur le temps qui figure dans (43) introduit une fonction delta de la variable

$\omega + [E'_{N-1, \mathbf{K}-\mathbf{k}} - E_{N, \mathbf{K}}] / \hbar$ avec un coefficient 2π . Nous obtenons donc finalement :

$$\begin{aligned} \overline{G}_1^N(\mathbf{k}, \omega) &= 2\pi \sum_{N, \mathbf{K}} \sum_{E, E', \alpha, \alpha'} \rho_{E, \mathbf{K}, \alpha}^N \left| \langle \Phi_{E, \mathbf{K}, \alpha}^N | a_{\mathbf{k}}^\dagger | \Phi_{E', \mathbf{K}-\mathbf{k}, \alpha'}^{N-1} \rangle \right|^2 \delta \left[\omega - \frac{E_{N, \mathbf{K}} - E'_{N-1, \mathbf{K}-\mathbf{k}}}{\hbar} \right] \end{aligned} \quad (44)$$

Le même type de calcul fournit également :

$$\begin{aligned} \overline{G}_1^{AN}(\mathbf{k}, \omega) &= 2\pi \sum_{N, \mathbf{K}} \sum_{E, E', \alpha, \alpha'} \rho_{E, \mathbf{K}, \alpha}^N \left| \langle \Phi_{E, \mathbf{K}, \alpha}^N | a_{\mathbf{k}} | \Phi_{E', \mathbf{K}+\mathbf{k}, \alpha'}^{N+1} \rangle \right|^2 \delta \left[\omega - \frac{E'_{N+1, \mathbf{K}+\mathbf{k}} - E_{N, \mathbf{K}}}{\hbar} \right] \end{aligned} \quad (45)$$

Supposons de plus que le système considéré soit à l'équilibre thermique et décrit par l'opérateur densité de l'équilibre grand-canonique :

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H - \mu \hat{N})} \quad (46)$$

avec les notations classiques : \hat{N} désigne l'opérateur nombre total de particules, $\beta = 1/k_B T$ (k_B est la constante de Boltzmann) et $Z = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(H - \mu \hat{N})} \right\}$ la fonction de partition grand-canonique. Les deux fonctions \overline{G}_1^N et \overline{G}_1^{AN} vérifient alors la relation simple, souvent appelée "conditions aux limites" :

$$\boxed{\overline{G}_1^{AN}(\mathbf{k}, \omega) = e^{\beta(\hbar\omega - \mu)} \overline{G}_1^N(\mathbf{k}, \omega)} \quad (47)$$

Cette relation s'avère cruciale dans bien des calculs en termes de fonctions de Green ; nous en ferons d'ailleurs usage au § 3.

Démonstration :

Pour établir cette relation, écrivons l'égalité (45) en utilisant le fait que $a_{\mathbf{k}}$ et $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ sont hermitiques conjugués. Il vient :

$$\begin{aligned} \overline{G}_1^{AN}(\mathbf{k}, \omega) &= 2\pi \sum_{N, \mathbf{K}} \sum_{E, E', \alpha, \alpha'} \rho_{\mathbf{K}, E, \alpha}^N \times \\ &\times \left| \langle \Phi_{E', \mathbf{K}+\mathbf{k}, \alpha'}^{N+1} | a_{\mathbf{k}}^\dagger | \Phi_{E, \mathbf{K}, \alpha}^N \rangle \right|^2 \delta \left[\omega - \frac{E'_{N+1, \mathbf{K}+\mathbf{k}} - E_{N, \mathbf{K}}}{\hbar} \right] \end{aligned} \quad (48)$$

Permutons alors les indices E' et E ainsi que les indices α et α' , changeons l'indice muet de sommation N en $N' = N + 1$, et enfin remplaçons la variable muette K par $K' = K + k$. Nous obtenons :

$$\begin{aligned} \overline{G}_1^{AN}(\mathbf{k}, \omega) &= 2\pi \sum_{N', \mathbf{K}'} \sum_{E, E', \alpha, \alpha'} \rho_{\mathbf{K}'-\mathbf{k}, E', \alpha'}^{N'-1} \times \\ &\times \left| \langle \Phi_{E, \mathbf{K}', \alpha}^{N'} | a_{\mathbf{k}}^\dagger | \Phi_{E', \mathbf{K}'-\mathbf{k}, \alpha'}^{N'-1} \rangle \right|^2 \delta \left[\omega - \frac{E_{N', \mathbf{K}'} - E'_{N'-1, \mathbf{K}'-\mathbf{k}}}{\hbar} \right] \end{aligned} \quad (49)$$

Dans cette sommation, comme dans (44), la valeur la plus basse de l'indice N' qui contribue est $N' = 1$; on retrouve donc la même expression que (44), avec (outre le

changement sans conséquence de l'indice muet N en N') pour seule modification le remplacement de $\rho_{\mathbf{K},E,\alpha}^N$ par $\rho_{\mathbf{K}'-\mathbf{k},E',\alpha'}^{N-1}$. Mais, comme :

$$\rho_{\mathbf{K},E,\alpha}^N = \frac{1}{Z} e^{-\beta[E_{N,\mathbf{K}}-\mu N]} \quad (50)$$

le rapport de ces deux éléments diagonaux $\rho_{\mathbf{K}'-\mathbf{k},E',\alpha'}^{N-1}/\rho_{\mathbf{K},E,\alpha}^N$ introduit dans l'intégrale un facteur :

$$e^{\beta[-E'_{N-1,\mathbf{K}'-\mathbf{k}}+\mu(N-1)+E_{N,\mathbf{K}}-\mu N]} = e^{\beta[E_{N,\mathbf{K}}-E_{N-1,\mathbf{K}'-\mathbf{k}}-\mu]} \quad (51)$$

Or la fonction delta de (49) permet de remplacer, dans l'exposant de ce facteur, la différence d'énergies par $\hbar\omega$:

$$e^{\beta[E_{N,\mathbf{K}}-E_{N-1,\mathbf{K}'-\mathbf{k}}-\mu]} \implies e^{\beta[\hbar\omega-\mu]} \quad (52)$$

Ce facteur sort alors de la somme, et la relation (47) est établie.

2-d. Discussion

Les expressions (44) et (45) permettent de se faire une idée du comportement des fonctions \overline{G}_1^N et \overline{G}_1^{AN} . Pour un gaz parfait, nous avons vu en (36) et (37) que ce sont des fonctions singulières, des fonctions delta contraignant l'énergie $\hbar\omega$ à prendre exactement la valeur de l'énergie cinétique à une particule $\hbar^2 k^2/2m$. La raison en est que, pour un gaz parfait, on peut choisir des états stationnaires $|\Phi_{E,\mathbf{K},\alpha}^N\rangle$ qui sont des états de Fock où chaque état individuel d'impulsion donnée $\hbar\mathbf{k}$ a une population bien définie. Dans un tel cas, l'opérateur $a_{\mathbf{k}}$ de l'expression (45) de \overline{G}_1^{AN} ne peut coupler par son élément de matrice $\langle \Phi_{E,\mathbf{K},\alpha}^N | a_{\mathbf{k}} | \Phi_{E',\mathbf{K}+\mathbf{k},\alpha'}^{N+1} \rangle$ qu'un seul état $|\Phi_{E',\mathbf{K}+\mathbf{k},\alpha'}^{N+1}\rangle$ à l'état de départ $|\Phi_{E,\mathbf{K},\alpha}^N\rangle$: l'état de Fock où le nombre d'occupation $n_{\mathbf{k}}$ est supérieur d'une unité. Il s'ensuit que la différence d'énergie $E'_{N+1,\mathbf{K}+\mathbf{k}}-E_{N,\mathbf{K}}$ prend toujours la même valeur, celle de l'énergie $\hbar^2 k^2/2m$ d'une particule individuelle d'impulsion $\hbar\mathbf{k}$. On retrouve ainsi les résultats du § 2-b.

Supposons maintenant que le système comporte des interactions mutuelles. L'élément de matrice $\langle \Phi_{E,\mathbf{K},\alpha}^N | a_{\mathbf{k}} | \Phi_{E',\mathbf{K}+\mathbf{k},\alpha'}^{N+1} \rangle$ donne alors le produit scalaire d'un état stationnaire du système à N particules par un autre état où une particule d'impulsion bien définie $\hbar\mathbf{k}$ est supprimée dans un état stationnaire du système à $N+1$ particules. Cet état n'a aucune raison d'être lui-même stationnaire, du fait des interactions entre particules. On s'attend donc à ce que cet état ait un produit scalaire non nul avec toute une série de kets $|\Phi_{E,\mathbf{K},\alpha}^N\rangle$ d'énergies différentes, qui peuvent être d'autant plus nombreux que le système physique est plus grand. La somme sur E ne se réduit alors plus à une seule valeur de l'énergie ; à la limite des grands systèmes, elle devient une somme continue qui absorbe la fonction delta, de sorte que la fonction $\overline{G}_1^{AN}(\mathbf{k},\omega)$ prend pour \mathbf{k} donné des valeurs non négligeables dans tout un domaine en ω ; a priori, ses variations dans ce domaine sont quelconques. Cependant, si les interactions ne sont pas trop intenses, par comparaison avec le gaz parfait, on s'attend à ce que le produit scalaire ait des valeurs non négligeables surtout dans un domaine d'énergies E' proches de $E_{N,\mathbf{K}} + \hbar^2 k^2/2m$. Pour chaque \mathbf{k} , l'effet des interactions est alors d'élargir le pic d'énergie infiniment étroit du gaz parfait, en lui donnant une largeur d'autant plus grande que les interactions

sont fortes. On interprète cette largeur comme indiquant une durée de vie finie de l'excitation qui a été créée en supprimant une particule libre au système de $N + 1$ particules dans un état stationnaire ; comme les modules des deux éléments de matrice $\langle \Phi_{E, \mathbf{K}, \alpha}^N | a_{\mathbf{k}} | \Phi_{E', \mathbf{K} + \mathbf{k}, \alpha'}^{N+1} \rangle$ et $\langle \Phi_{E', \mathbf{K} + \mathbf{k}, \alpha'}^{N+1} | a_{\mathbf{k}}^\dagger | \Phi_{E, \mathbf{K}, \alpha}^N \rangle$ sont égaux, on peut également interpréter cette durée de vie comme celle de l'excitation créée en ajoutant une particule libre au système de N particules dans un état stationnaire.

3. Fonction spectrale, règle de somme

La formule (7) rend naturelle l'introduction d'une fonction réelle $A(\mathbf{k}, \omega)$ définie par :

$$A(\mathbf{k}, \omega) = \overline{G}_1^{AN}(\mathbf{k}, \omega) - \eta \overline{G}_1^N(\mathbf{k}, \omega) \quad (53)$$

On appelle $A(\mathbf{k}, \omega)$ "fonction spectrale" ; sa réalité découle de celle des fonctions \overline{G}_1^N et \overline{G}_1^{AN} .

Pour le gaz parfait, la formule (38) montre qu'on a simplement :

$$A(\mathbf{k}, \omega) = 2\pi \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}}) \quad (54)$$

mais cette égalité n'est plus valable dès que les particules interagissent. Nous verrons cependant que la fonction spectrale permet d'exprimer les fonctions de corrélation par une formule générale qui rappelle celle d'un gaz parfait, même en présence d'interactions.

3-a. Expression des fonctions de corrélation à une particule

Si l'on reporte (47) dans la définition de $A(\mathbf{k}, \omega)$, on obtient :

$$A(\mathbf{k}, \omega) = \overline{G}_1^N \left[e^{\beta(\hbar\omega - \mu)} - \eta \right] \quad (55)$$

soit :

$$\overline{G}_1^N(\mathbf{k}, \omega) = A(\mathbf{k}, \omega) f_\beta^\eta(\hbar\omega - \mu) \quad (56)$$

où $f_\beta^\eta(\hbar\omega - \mu)$ est la distribution habituelle de Bose-Einstein pour des bosons, de Fermi-Dirac pour des fermions :

$$f_\beta^\eta(\hbar\omega - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(\hbar\omega - \mu)} - \eta} \quad (57)$$

Utilisant à nouveau (47), nous obtenons :

$$\overline{G}_1^{AN}(\mathbf{k}, \omega) = e^{\beta(\hbar\omega - \mu)} A(\mathbf{k}, \omega) f_\beta^\eta(\hbar\omega - \mu) = A(\mathbf{k}, \omega) \left[1 + \eta f_\beta^\eta(\hbar\omega - \mu) \right] \quad (58)$$

Ainsi, la connaissance de la fonction spectrale $A(\mathbf{k}, \omega)$ permet de déterminer les fonctions de corrélation à une particule par des formules qui sont semblables à celles du gaz parfait, faisant intervenir les mêmes fonctions de distribution quantiques f_β^η . Cependant, en présence d'interactions, les deux variables énergie $\hbar\omega$ et impulsion $\hbar\mathbf{k}$ sont indépendantes, alors que pour le gaz parfait elles restent contraintes par la relation (54).

3-b. Règle de somme

Insérons les relations (28) et (2) dans (53) ; comme les opérateurs Ψ et Ψ_H coïncident à $t = 0$, il vient :

$$A(\mathbf{k}, \omega) = \int d^3r' \int dt' e^{i(\omega t' - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}')} \text{Tr} \left\{ \rho [\Psi_H(\mathbf{r}', t'), \Psi^\dagger(\mathbf{r} = \mathbf{0})]_{-\eta} \right\} \quad (59)$$

Par sommation sur ω , une fonction delta du temps s'introduit :

$$\int d\omega A(\mathbf{k}, \omega) = 2\pi \int d^3r' e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} \text{Tr} \left\{ \rho [\Psi(\mathbf{r}'), \Psi^\dagger(\mathbf{r} = \mathbf{0})]_{-\eta} \right\} \quad (60)$$

soit :

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} A(\mathbf{k}, \omega) = \int d^3r' e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r}') = 1 \quad (61)$$

En présence d'interactions, la dépendance en \mathbf{k} et ω de la fonction spectrale n'est pas connue a priori. Cependant, pour chaque valeur de \mathbf{k} , les interactions ne peuvent modifier que sa répartition en fréquences, sans changer son intégrale sur ω .

Nous avons vu que, pour un gaz dont les particules interagissent entre elles, l'effet de ces interactions est de "diluer" la fonction spectrale sur un certain domaine de fréquences, tout en respectant la règle de somme (61). Il n'existe alors pas de raison pour que la fonction spectrale ait une forme particulière, ou contienne encore des fonctions delta de la fréquence. Il arrive cependant souvent qu'elle présente des pics marqués ; leur étroitesse signale alors l'existence d'excitations du système qui se comportent presque comme des particules libres (leur durée de vie est longue). On nomme ces excitations "quasi-particules" puisqu'elles constituent en quelque sorte le prolongement des particules indépendantes du gaz parfait, une fois que les interactions ont été introduites. Le pic associé à une particule d'impulsion $\hbar\mathbf{k}$ n'est pas en général centré sur l'énergie $e_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ d'une particule libre : en plus de l'élargissement, les énergies des quasi-particules sont déplacées par les interactions. Cet élargissement et ce déplacement rappellent les résultats obtenus au Complément D_{XIII}, où l'on étudie à l'ordre le plus bas le couplage d'un état discret à un continuum ; de façon imagée, on peut dire que les interactions couplent l'état d'une particule libre d'impulsion $\hbar\mathbf{k}$ à un continuum d'états d'impulsions différentes, ce qui explique l'analogie. Mais, ici, les résultats concernent, non pas une, mais un ensemble de particules identiques ainsi que ses propriétés à l'équilibre thermique ; la situation physique est donc différente.

En résumé, pour passer du gaz parfait (où ω est nécessairement égal à ω_k) à un gaz en interaction, il suffit d'introduire pour chaque valeur de \mathbf{k} dans les fonctions de Green une pondération par une fonction spectrale $A(\mathbf{k}, \omega)$; cette dernière répartit la dépendance en ω sur un certain domaine de fréquences. Nous allons voir que la simple donnée de la fonction spectrale permet de résumer de nombreuses propriétés d'un système physique en interaction. Mais, bien sûr, cela ne veut pas dire que la fonction spectrale soit facile à calculer ! Au contraire, dans la plupart des systèmes physiques en interaction, on ne connaît pas sa valeur exacte. Toutefois, son existence même, indépendamment de sa connaissance mathématique précise, fournit un outil très utile pour les raisonnements.

3-c. Expression de diverses quantités physiques

La fonction spectrale contient de l'information sur un grand nombre de propriétés physiques des systèmes en interaction, sous une forme bien plus concise que l'opérateur densité du système à N corps lui-même, qui contient tout mais est mathématiquement bien plus compliqué qu'une simple fonction.

Considérons tout d'abord la densité de particules, qui est donnée par :

$$n(\mathbf{r}) = \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) \rangle = G_1^N(\mathbf{r}, 0; \mathbf{r}, 0) \quad (62)$$

selon la définition (2) de la fonction normale G_1^N . Pour un système invariant par translation, cette densité est indépendante de \mathbf{r} , et nous pouvons donc choisir $\mathbf{r} = 0$. La densité est alors la valeur à l'origine de la fonction normale (31) soit, compte tenu de (56) :

$$n = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \overline{G}_1^N(\mathbf{k}, \omega) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} A(\mathbf{k}, \omega) f_\beta^\eta(\hbar\omega - \mu) \quad (63)$$

Etudions maintenant une quantité donnant une information plus précise, la répartition en impulsion des particules, en calculant le nombre moyen $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$ de particules d'impulsion $\hbar\mathbf{k}$. Nous supposons que le système est contenu dans une boîte cubique de volume \mathcal{V} . Les relations (A-9) et (A-10) du Chapitre XVI, appliquées au cas où les fonctions d'onde de base sont données par (12), conduisent à :

$$\langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r' \int d^3r e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}) \rangle \quad (64)$$

Remplaçons la variable d'intégration \mathbf{r} par $\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Il apparaît alors la valeur moyenne $\langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}' + \mathbf{s}) \rangle$ qui est indépendante de \mathbf{r}' du fait de l'invariance par translation ; nous pouvons donc y remplacer \mathbf{r}' par zéro, et l'intégrale sur d^3r' donne alors simplement le volume \mathcal{V} . Il reste :

$$\langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \int d^3s e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}} \langle \Psi^\dagger(\mathbf{0})\Psi(\mathbf{s}) \rangle \quad (65)$$

Or, si l'on intègre la définition (28) de $\overline{G}_1^N(\mathbf{k}, \omega)$ sur ω , compte tenu de (2) on obtient :

$$\begin{aligned} \int d\omega \overline{G}_1^N(\mathbf{k}, \omega) &= 2\pi \int d^3r' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} G_1^N(0, 0; \mathbf{r}', 0) \\ &= 2\pi \int d^3r' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \langle \Psi^\dagger(\mathbf{0})\Psi(\mathbf{r}') \rangle \end{aligned} \quad (66)$$

qui est la même expression que (65) à un facteur 2π près. Il s'ensuit que⁷ :

$$\langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int d\omega \overline{G}_1^N(\mathbf{k}, \omega) = \int \frac{d\omega}{2\pi} A(\mathbf{k}, \omega) f_\beta^\eta(\hbar\omega - \mu) \quad (67)$$

7. Pour un gaz parfait de bosons, le potentiel chimique reste toujours inférieur à l'énergie individuelle la plus basse, de sorte que la divergence de la fonction de distribution f_β^η n'est jamais atteinte. Mais, comme ω est intégré de $-\infty$ à $+\infty$ dans (67), cette divergence semble inévitable. Cependant, la relation (55) montre que la fonction spectrale $A(\mathbf{k}, \omega)$ de bosons s'annule pour $\hbar\omega = \mu$, pourvu que la fonction \overline{G}_1^N reste régulière en ce point. Les intégrales (63), (67) et (68) ne présentent donc pas de divergence associée à cette valeur de ω .

De même, on peut montrer que l'énergie moyenne⁸ par unité de volume $\langle H \rangle / \mathcal{V}$ du système est donnée par :

$$\frac{\langle H \rangle}{\mathcal{V}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left[\hbar \frac{\omega + \omega_k}{2} \right] A(\mathbf{k}, \omega) f_\beta^\eta(\hbar\omega - \mu) \quad (68)$$

où ω_k est défini en (14). Une fois cette fonction connue, on peut remonter par intégration sur β au logarithme de la fonction de partition, qui fournit à son tour par dérivation toutes les quantités thermodynamiques (densité de particules, pression, etc.). Il est remarquable que la fonction spectrale, dont la définition à partir des fonctions de Green à une seule particule pourrait laisser croire qu'elle ne contient d'information que sur l'opérateur densité à une particule, permette en fait de calculer toutes ces quantités physiques qui dépendent des corrélations entre particules, et donc des interactions. Cette méthode ramène l'étude des propriétés à N corps au calcul de fonctions définies mathématiquement pour une particule unique. Elle généralise en quelque sorte les équations du gaz parfait, tout en tenant compte rigoureusement de la présence de l'ensemble des particules à l'équilibre thermique ainsi que de leur indiscernabilité ; elle est donc très puissante.

Cependant, ce n'est évidemment pas pour autant que le calcul des propriétés à l'équilibre d'un système en interaction peut être considéré comme résolu ; en pratique, la connaissance des valeurs précises de la fonction spectrale peut poser un problème mathématique difficile. Dans le but de le résoudre, de nombreuses méthodes d'approximation ont été développées, mettant en particulier en jeu la notion de "self-énergie" et de diagrammes de perturbations, mais ceci dépasse le cadre de ce complément.

8. Pour démontrer la relation (68), on pourra commencer par calculer l'évolution temporelle de $\Psi_H(\mathbf{r}, t)$ et de $\Psi_H^\dagger(\mathbf{r}, t')$ pour en déduire l'expression de $i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t'} \right) \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}, t') \Psi_H(\mathbf{r}, t)$, puis prendre la valeur moyenne et effectuer une transformation de Fourier pour retrouver la valeur moyenne de l'énergie ; voir par exemple le § 2.2 de la référence [7].

Complément C_{XVI}

Théorème de Wick

1	Démonstration du théorème	223
	1-a Position du problème	223
	1-b Relation de récurrence	224
	1-c Contractions	226
	1-d Énoncé du théorème	227
2	Applications : fonctions de corrélation d'un gaz parfait	228
	2-a Fonction de corrélation d'ordre un	228
	2-b Fonctions de corrélation d'ordre deux	230
	2-c Fonctions de corrélation d'ordre plus élevé	232

Pour un gaz parfait à l'équilibre thermique, nous avons calculé dans le Complément B_{XV} les valeurs moyennes des opérateurs à une et deux particules, et montré qu'elles s'expriment toutes en fonction des distributions quantiques à un corps f_β (distribution de Fermi-Dirac pour des fermions, de Bose-Einstein pour des bosons). Nous établissons dans ce complément un théorème qui permet de généraliser ces résultats aux opérateurs faisant intervenir un nombre quelconque de particules. Le § 1 est consacré à la démonstration du théorème de Wick, le § 2 à son application au calcul des fonctions de corrélation d'un gaz parfait.

1. Démonstration du théorème

Nous considérons un gaz parfait à l'équilibre thermique, décrit dans le cadre de l'ensemble grand-canonique (Appendice VI, § 1-c), et d'opérateur densité :

$$\rho_{eq} = \frac{1}{Z} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \tag{1}$$

où $\beta = 1/k_B T$ est l'inverse de la température multipliée par la constante de Boltzmann k_B , μ le potentiel chimique, et \hat{H} l'hamiltonien :

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad \text{avec :} \quad e_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{2}$$

La fonction de partition grand-canonique Z est définie par :

$$Z = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right\} \tag{3}$$

1-a. Position du problème

Nous nous intéressons au calcul de la valeur moyenne $\langle A_P \rangle$ d'un produit d'opérateurs :

$$A_P = b_1 b_2 \dots b_P \tag{4}$$

où chacun des opérateurs b_k est, soit un opérateur d'annihilation a_k , soit un opérateur de création a_k^\dagger :

$$b_k = \begin{cases} a_k \\ a_k^\dagger \end{cases} \quad (5)$$

Compte tenu des relations (A-48) et (A-49) du Chapitre XV, nous avons :

$$\begin{aligned} [b_i, b_j]_{-\eta} &= b_i b_j - \eta b_j b_i \\ &= \begin{cases} 0 & \text{si } b_i \text{ et } b_j \text{ sont tous deux opérateurs de création ou d'annihilation} \\ \delta_{ij} & \text{si } b_i \text{ est un opérateur d'annihilation et } b_j \text{ de création} \\ -\eta \delta_{ij} & \text{si } b_i \text{ est un opérateur de création et } b_j \text{ d'annihilation} \end{cases} \end{aligned} \quad (6)$$

avec $\eta = +1$ pour des bosons et $\eta = -1$ pour des fermions.

La valeur moyenne de A_P est calculée en supposant que l'état quantique est décrit par l'opérateur densité ρ_{eq} donné en (1) :

$$\langle A_P \rangle = \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_1 b_2 \dots b_P \} \quad (7)$$

Compte tenu du fait que ρ_{eq} est diagonal dans la base des états de Fock associés aux a_k , cette valeur moyenne ne peut être différente de zéro que si la série des opérateurs b contient, pour chaque opérateur de création a_k^\dagger , un opérateur a_k d'annihilation dans ce même état individuel ; les uns doivent compenser exactement les autres en apparaissant le même nombre de fois. En particulier, la valeur moyenne $\langle A_P \rangle$ est toujours nulle si P est impair ; à partir de maintenant, nous supposons donc $P = 2n$ avec n entier.

1-b. Relation de récurrence

Nous calculons :

$$\langle A_{2n} \rangle = \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_1 b_2 \dots b_{2n} \} \quad (8)$$

Pour cela, nous commençons par changer l'ordre de b_1 et b_2 en utilisant l'une des relations (6) ; puis nous ferons progresser b_1 vers la droite d'un cran de plus en le permutant avec b_3 , puis avec b_4 , etc. jusqu'à ce que la permutation avec b_{2n} l'amène en toute dernière position. Comme une trace est invariante par permutation circulaire, l'opérateur b_1 peut alors revenir en tête, devant ρ_{eq} ; une dernière commutation avec ρ_{eq} , que nous calculerons plus bas, le fait revenir à sa place initiale et permet de calculer la valeur de $\langle A_{2n} \rangle$ en fonction de valeurs moyennes d'un produit de $2(n-1)$ opérateurs. Le calcul est donc le suivant :

$$\begin{aligned} \langle A_{2n} \rangle &= \text{Tr} \left\{ \rho_{eq} [b_1, b_2]_{-\eta} b_3 b_4 \dots b_{2n} \right\} + \eta \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_2 b_1 b_3 b_4 \dots b_{2n} \} \\ &= [b_1, b_2]_{-\eta} \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_3 b_4 \dots b_{2n} \} + \eta [b_1, b_3]_{-\eta} \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_2 b_4 \dots b_{2n} \} \\ &\quad + \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_2 b_3 b_1 b_4 \dots b_{2n} \} \\ &= [b_1, b_2]_{-\eta} \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_3 b_4 \dots b_{2n} \} + \eta [b_1, b_3]_{-\eta} \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_2 b_4 \dots b_{2n} \} + \dots \\ &\quad \dots + \eta^{2n-2} [b_1, b_{2n}]_{-\eta} \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_2 b_3 b_4 \dots b_{2n-1} \} \\ &\quad \quad \quad + \eta^{2n-1} \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_2 b_3 b_4 \dots b_{2n} b_1 \} \end{aligned} \quad (9)$$

La plupart des termes du second membre sont en général nuls : le premier n'est non nul que si b_1 et b_2 sont deux opérateurs conjugués (l'un d'annihilation et l'autre de création, relatifs au même état quantique individuel) ; le second n'est non nul que si c'est le cas pour les deux opérateurs b_1 et b_3 , etc.

Une permutation circulaire sous la trace permet alors de mettre le dernier terme de cette somme sous la forme :

$$\eta^{2n-1} \text{Tr} \{ b_1 \rho_{eq} b_2 b_3 \dots b_{2n} \} \tag{10}$$

Nous relierons maintenant les deux opérateurs $b_1 \rho_{eq}$ et $\rho_{eq} b_1$, montrant qu'ils sont proportionnels entre eux. En effet, supposons par exemple que b_1 soit un opérateur de création a_q^\dagger ; dans l'opérateur ρ_{eq} défini en (1), tous les termes $k \neq q$ commutent avec a_q^\dagger et le changement d'ordre des opérateurs se résume à la comparaison entre les deux expressions :

$$a_q^\dagger e^{-\beta(e_q - \mu)} a_q^\dagger a_q \quad \text{et} \quad e^{-\beta(e_q - \mu)} a_q^\dagger a_q a_q^\dagger \tag{11}$$

Or, par action sur les vecteurs de Fock, on vérifie que (c'est ici qu'intervient l'hypothèse de l'équilibre thermique) :

$$a_q^\dagger e^{-\beta(e_q - \mu)} a_q^\dagger a_q = e^{\beta(e_q - \mu)} \times e^{-\beta(e_q - \mu)} a_q^\dagger a_q a_q^\dagger \tag{12}$$

et donc que :

$$a_q^\dagger \rho_{eq} = e^{\beta(e_q - \mu)} \rho_{eq} a_q^\dagger \tag{13}$$

Si b_1 est un opérateur d'annihilation, le même raisonnement montre que le changement d'ordre introduit un facteur inverse, à savoir $e^{-\beta(e_n - \mu)}$. En résumé :

$$b_1 \rho_{eq} = e^{\pm \beta(e_1 - \mu)} \rho_{eq} b_1 \tag{14}$$

où il faut prendre le signe + dans l'exponentielle si b_1 est un opérateur de création, le signe - s'il est un opérateur b_1 d'annihilation. Ainsi, le dernier terme de (9) introduit $e^{\pm \beta(e_1 - \mu)} \langle A_{2n} \rangle$, avec un facteur $\eta^{2n-1} = \eta$ puisque $\eta = \pm 1$.

Si nous faisons passer ce dernier terme au premier membre, il vient :

$$\begin{aligned} \langle A_{2n} \rangle \left[1 - \eta e^{\pm \beta(e_1 - \mu)} \right] &= [b_1, b_2]_{-\eta} \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_3 \dots b_{2n} \} \\ &+ \eta [b_1, b_3]_{-\eta} \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_2 b_4 \dots b_{2n} \} + \dots \\ &+ \eta^{2n-2} [b_1, b_{2n}]_{-\eta} \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_2 b_3 \dots b_{2n-1} \} \end{aligned} \tag{15}$$

Dans le second membre de cette égalité, tous les (anti)commutateurs $[b_1, b_2]_{-\eta}$ sont en réalité des nombres. De plus, beaucoup sont nuls : comme plus haut, seuls sont non nuls ceux pour lesquels les deux opérateurs b concernés sont conjugués (l'un de création, l'autre d'annihilation, concernant le même état quantique individuel). La valeur moyenne recherchée du produit de $2n$ opérateurs s'exprime donc comme une combinaison linéaire de valeurs moyennes de produits de $2n - 2$ opérateurs.

1-c. Contractions

Nous définissons alors la “contraction” de deux opérateurs b_i et b_j comme le nombre, noté $\overline{b_i b_j}$, défini par :

$$\overline{b_i b_j} = \frac{1}{1 - \eta e^{\pm \beta(e_i - \mu)}} \times [b_i, b_j]_{-\eta} = -\eta f_\beta(\pm(e_i - \mu)) \times [b_i, b_j]_{-\eta} \quad (16)$$

où f_β est la distribution de Fermi-Dirac f_β^{FD} pour des fermions, celle de Bose-Einstein f_β^{BE} pour des bosons :

$$f_\beta(e - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(e - \mu)} - \eta} \quad (17)$$

La contraction est nulle si les deux opérateurs b_i et b_j concernent des états quantiques individuels différents ; elle l’est également s’ils sont tous deux de création ou tous deux d’annihilation dans le même état quantique individuel. Si b_i est l’opérateur de création et b_j l’opérateur d’annihilation dans le même état individuel, la contraction est simplement égale à :

$$\overline{b_i b_j} = \frac{-\eta}{1 - \eta e^{+\beta(e_i - \mu)}} = f_\beta(e_i - \mu) \quad (18)$$

la fonction de distribution $f_\beta(e_i - \mu)$; dans le cas opposé, la contraction est donnée par :

$$\overline{b_i b_j} = \frac{1}{1 - \eta e^{-\beta(e_i - \mu)}} = 1 + \eta f_\beta(e_i - \mu) \quad (19)$$

La relation (15) peut alors être ré-écrite :

$$\begin{aligned} \langle A_{2n} \rangle = & \overline{b_1 b_2} \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_3 \dots b_{2n} \} + \overline{\eta b_1 b_3} \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_2 b_4 \dots b_{2n} \} + \dots \\ & \dots + \overline{\eta^{2n-2} b_1 b_{2n}} \text{Tr} \{ \rho_{eq} b_2 b_3 b_1 \dots b_{2n-1} \} \end{aligned} \quad (20)$$

soit encore :

$$\langle A_{2n} \rangle = \overline{b_1 b_2 b_3 \dots b_{2n}} + \overline{b_1 b_2 b_3 \dots b_{2n}} + \dots + \overline{b_1 b_2 b_3 \dots b_{2n}} \quad (21)$$

avec la notation :

$$\overline{b_1 b_2 \dots b_i \dots b_j \dots b_l \dots b_{2n}} = (\varepsilon_\alpha) \overline{b_i b_l} \langle b_1 b_2 \dots b_j \dots b_{2n} \rangle \quad (22)$$

Dans cette expression, pour des fermions ε_α est la parité de la permutation qui amène l’opérateur b_l à côté de b_i ; pour des bosons, $\varepsilon_\alpha = 1$. La valeur moyenne de droite contient $2n - 2$ opérateurs, les deux opérateurs b_i et b_l en ayant disparu.

On procède alors par récurrence : chacune des valeurs moyennes du second membre de (20) est du type de celle $\langle A_{2n} \rangle$ écrite en (8), la seule différence étant que n a diminué d’une unité. Traitant chacune des valeurs moyennes $\langle A_{2n-2} \rangle$ comme nous l’avons fait pour $\langle A_{2n} \rangle$, cette dernière apparaît maintenant comme une double

somme de termes contenant deux contractions et des valeurs moyennes $\langle A_{2n-4} \rangle$. Continuant ainsi autant de fois que nécessaire, la valeur moyenne $\langle A_{2n} \rangle$ est mise sous la forme d'une somme de divers produits de n contractions.

Pour rendre les choses plus concrètes, examinons quelques cas simples. Si $n = 1$, on a directement :

$$\langle b_1 b_2 \rangle = \overline{b_1 b_2} \tag{23}$$

Si b_1 est un opérateur de création et b_2 l'opérateur d'annihilation correspondant, on obtient le résultat (18), équivalent aux relations (19) et (23) du Complément B_{XV} ; si on inverse l'ordre des opérateurs, c'est (19) que l'on obtient, qui découle directement du résultat précédent et de la relation de commutation ou d'anticommutation (6). Dans tous les autres cas, on trouve zéro pour les deux membres de l'égalité.

Si $n = 2$, on utilise une première fois la relation (15) pour obtenir :

$$\langle b_1 b_2 b_3 b_4 \rangle = \overline{b_1 b_2} \langle b_3 b_4 \rangle + \overline{b_1 b_3} \langle b_2 b_4 \rangle + \overline{b_1 b_4} \langle b_2 b_3 \rangle \tag{24}$$

Puis, à nouveau par cette même relation, on calcule chacune des valeurs moyennes de produits de deux opérateurs b , ce qui donne :

$$\langle b_1 b_2 b_3 b_4 \rangle = \overline{b_1 b_2} \overline{b_3 b_4} + \eta \overline{b_1 b_2 b_3 b_4} + \overline{b_1 b_2 b_3} \overline{b_4} \tag{25}$$

Le résultat final ne contient donc plus que des produits de deux contractions, donc de deux fonctions de distribution. On vérifie aisément que, parmi ces trois produits, le nombre maximal de ceux qui sont non nuls est deux.

1-d. **Enoncé du théorème**

La récurrence sur n que nous avons utilisée aboutit au théorème de Wick :

“La valeur moyenne $\langle b_1 b_2 \dots b_i \dots b_l \dots b_{2n} \rangle$ est égale à la somme de tous les systèmes complets de contractions que l'on peut effectuer dans la série des opérateurs $b_1 b_2 \dots b_i \dots b_l \dots b_{2n}$. Chaque système contribue par le produit des contractions binaires (16) ; pour des fermions, ce produit est multiplié par les facteurs de parité ε_α associés à chacune d'entre elles”.

Le mot “complet” implique ici que, dans chaque système de contractions pris en compte, chaque opérateur de la suite des b_i est pris dans une contraction et une seule. Le facteur de parité comprend d'abord la parité ε_{α_1} de la permutation qui amène juste après b_1 l'opérateur qui lui est relié par la même contraction ; on supprime ensuite ces deux opérateurs de la liste des b_i . Dans la liste restante, on calcule à nouveau la parité ε_{α_2} de la permutation qui rend consécutifs les deux premiers opérateurs contractés, et on la multiplie par ε_{α_1} . On procède ainsi jusqu'à ce que toutes les contractions soient prises en compte pour obtenir le produit $\varepsilon_{\alpha_1} \varepsilon_{\alpha_2} \dots \varepsilon_{\alpha_n}$ de toutes les parités concernées. Bien sûr, parmi tous ces systèmes de contractions, un très grand nombre donne zéro ; seuls sont non nuls ceux où toutes les contractions contiennent un opérateur de création et un autre d'annihilation dans le même état quantique individuel. Cette règle limite significativement le nombre de contractions qui interviennent dans le résultat final.

Comme nous l'avons vu plus haut, on retrouve ainsi les résultats du Complément B_{XV}. Par exemple, si (comme c'est le cas dans la formule donnant les opérateurs symétriques à deux particules) les deux premiers opérateurs b sont de création, les deux derniers d'annihilation, le premier système de contraction de (25) donne zéro, et seuls interviennent les deux derniers ; on retrouve alors les deux termes de l'équation (43) du Complément B_{XV}. Mais l'intérêt du théorème est de permettre d'obtenir presque sans calcul la valeur moyenne du produit d'un nombre quelconque d'opérateurs.

Remarque :

Jusqu'ici nous avons supposé que les opérateurs b étaient des opérateurs (création ou annihilation) relatifs à la base des états individuels qui sont vecteurs propres de l'hamiltonien à une particule. Si ce n'est pas le cas, et si l'on a besoin de calculer la valeur moyenne de produits d'opérateurs de création $a_{v_s}^\dagger$ et d'annihilation a_{v_s} dans une base quelconque, on commence par utiliser les formules (A-51) et (A-52) du Chapitre XV pour exprimer ces opérateurs en fonction des opérateurs associés à la base propre de l'hamiltonien à une particule, et on fait ensuite appel au théorème de Wick.

2. Applications : fonctions de corrélation d'un gaz parfait

A titre d'illustration de l'utilisation du théorème de Wick, nous l'appliquons maintenant au calcul des fonctions de corrélation d'ordre N d'un gaz parfait à l'équilibre thermique. Le théorème de Wick permet de les exprimer directement toutes comme de simples produits de fonctions de corrélation d'ordre un. Dans un premier temps, nous ne ferons que retrouver un certain nombre de résultats du § 3 du Complément B_{XV}, mais plus simplement ; nous les généralisons ensuite à des fonctions de corrélation d'ordre plus élevé.

Nous supposons les particules du gaz sans spin, et confinées par l'action d'un potentiel dans une boîte cubique de côté L ; ce potentiel reste nul ($\widehat{V}_1 = 0$) à l'intérieur de la boîte, mais devient infini à l'extérieur. Nous prenons en compte ce confinement en utilisant les conditions aux limites périodiques (Complément C_{XIV}, § 1.c) ; les fonctions propres $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ normalisées de l'énergie cinétique s'écrivent alors :

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (26)$$

où les vecteurs d'onde \mathbf{k} possibles sont tous ceux dont les trois composantes sont des multiples entiers de $2\pi/L$.

2-a. Fonction de corrélation d'ordre un

La relation (B-21) du Chapitre XVI définit la fonction de corrélation G_1 d'ordre 1, dépendant des deux positions \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}'_1 :

$$G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \Psi(\mathbf{r}'_1) \rangle \quad (27)$$

Les relations (A-3) et (A-6) du Chapitre XVI nous permettent d'exprimer l'opérateur champ en fonction des opérateurs $a_{\mathbf{k}}$ d'annihilation dans l'état (26), et son adjoint

en fonction des opérateurs $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ de création dans le même état. Compte tenu de (26), cette substitution conduit à :

$$G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'_1 - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1)} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} \rangle \quad (28)$$

A l'équilibre thermique, toutes les valeurs moyennes $\langle A \rangle$ d'opérateurs A sont prises dans l'état décrit par l'opérateur densité ρ_{eq} écrit en (1) :

$$\langle A \rangle = \text{Tr} \{ \rho_{eq} A \} \quad (29)$$

Nous pouvons alors utiliser le théorème de Wick, dans un cas particulièrement simple, puisque dans (28) la seule contraction qui intervient est celle contenant $\left[a_{\mathbf{k}}^\dagger, a_{\mathbf{k}'} \right]_{-\eta}$. La relation (18) s'applique alors, et nous obtenons :

$$G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_1)} f_\beta (e_{\mathbf{k}} - \mu) \quad (30)$$

La fonction de corrélation $G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est donc directement (à un facteur constant près) la transformée de Fourier de la fonction de distribution $f_\beta (e_{\mathbf{k}} - \mu)$ elle-même.

On peut généraliser la définition de G_1 en utilisant les expressions des opérateurs champ en représentation de Heisenberg, ce qui conduit à une fonction de corrélation dépendant des positions et des temps :

$$G_1(\mathbf{r}_1, t; \mathbf{r}'_1, t') = \langle \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}_1, t) \Psi_H(\mathbf{r}'_1, t') \rangle \quad (31)$$

Pour des particules libres (gaz parfait), on a (§ 1-c du complément B_{XVI}) :

$$\Psi_H(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_k t)} a_{\mathbf{k}} \quad (32)$$

où ω_k est la fréquence (angulaire) de Bohr associée à l'énergie d'une particule de vecteur d'onde \mathbf{k} :

$$\omega_k = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (33)$$

et m la masse d'une particule. Pour un gaz parfait, il suffit donc de multiplier chaque exponentielle $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ par $e^{-i\omega_k t}$ pour passer de la représentation de Schrödinger à celle de Heisenberg. L'expression (30) se généralise alors en :

$$G_1(\mathbf{r}_1, t; \mathbf{r}'_1, t') = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_1) - \omega_k (t' - t)]} f_\beta (e_{\mathbf{k}} - \mu) \quad (34)$$

On remarque que cette fonction de corrélation ne dépend que des différences de positions (homogénéité dans l'espace) et de temps (invariance par translation dans le temps).

2-b. Fonctions de corrélation d'ordre deux

$\alpha.$ *Application du théorème de Wick*

La fonction de corrélation d'ordre deux est définie par :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) = \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}'_2) \Psi(\mathbf{r}'_1) \rangle \quad (35)$$

Ici aussi, la valeur moyenne est calculée avec l'opérateur densité à l'équilibre thermique. Le même calcul qu'au § 2-a conduit à :

$$\begin{aligned} G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) &= \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \sum_{\mathbf{k}'''} e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'_1 + \mathbf{k}''' \cdot \mathbf{r}'_2 - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}'' \cdot \mathbf{r}_2)} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}''}^\dagger a_{\mathbf{k}'''} a_{\mathbf{k}'} \rangle \end{aligned} \quad (36)$$

Comme nous l'avons déjà vu en (25), l'utilisation du théorème de Wick fait alors apparaître deux systèmes de contractions : celui où $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ est contracté avec $a_{\mathbf{k}'}$ (et donc $a_{\mathbf{k}''}^\dagger$ avec $a_{\mathbf{k}'''}), et celui où $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ est contracté avec $a_{\mathbf{k}''}$ (et donc $a_{\mathbf{k}''}^\dagger$ avec $a_{\mathbf{k}'}$). La seconde contraction fait intervenir une permutation impaire, et introduit donc un facteur η . On obtient ainsi (avec un changement d'indice muet \mathbf{k}'' en \mathbf{k}') :$

$$\begin{aligned} G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) &= \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \left[e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_1) + \mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_2)]} + \eta e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_1) + \mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2)]} \right] \\ &\quad \times f_\beta(e_{\mathbf{k}} - \mu) f_\beta(e_{\mathbf{k}'} - \mu) \end{aligned} \quad (37)$$

soit, compte tenu de (30) :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) = G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \times G_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) + \eta G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_2) \times G_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1) \quad (38)$$

Ainsi, la fonction de corrélation d'ordre deux s'exprime-t-elle simplement comme la somme de deux produits de fonctions de corrélation d'ordre un. Le premier est le terme direct, et correspond à des particules totalement incorrélées. Le second est le terme d'échange, conséquence de l'indiscernabilité quantique des particules ; il a un signe opposé pour les fermions et pour les bosons. Comme au Complément A_{XVI}, nous allons voir que ce terme introduit des corrélations entre particules.

$\beta.$ *Densité double*

On s'intéresse souvent au cas "diagonal" où $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}'_1$ et $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}'_2$, car la fonction $G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)$ devient alors particulièrement simple à interpréter : c'est la "densité double" $G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ caractérisant la probabilité de trouver une particule au point \mathbf{r}_1 et une autre au point \mathbf{r}_2 . La relation précédente se simplifie alors en :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) \times G_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2) + \eta G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \times G_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (39)$$

Lorsque de plus $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$, cette fonction indique la probabilité de trouver deux particules au même point. On trouve alors :

$$\begin{cases} \text{pour des fermions} & G_2(\mathbf{r}; \mathbf{r}) = 0 \\ \text{pour des bosons} & G_2(\mathbf{r}; \mathbf{r}) = 2 [G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r})]^2 \end{cases} \quad (40)$$

Pour des fermions, on retrouve le fait que deux d'entre eux ne peuvent jamais se trouver au même point de l'espace, en conséquence du principe d'exclusion de Pauli. Pour les bosons, on trouve que la densité double est le double du carré de la densité à un corps. Or, si les deux particules étaient incorrélées, cette densité double serait simplement égale au carré, sans facteur deux. Ce facteur deux indique donc une augmentation de la probabilité de trouver les deux bosons au même point de l'espace ; il traduit la tendance au groupement de bosons identiques, tendance qui résulte d'un pur effet de statistique quantique puisque nous avons supposé nulles les interactions entre particules. Ces résultats ont déjà été discutés au Complément A_{XVI} – voir en particulier la Figure 3.

La méthode de Hartree-Fock (approximation du champ moyen), présentée aux Compléments E_{XV} et F_{XV}, utilise un ket (ou un opérateur densité) variationnel tel que la fonction de corrélation binaire $G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ est donnée par la somme de produits de fonctions G_1 écrite en (39), même en présence d'interactions. Une autre façon d'introduire l'approximation de Hartree-Fock est d'ailleurs de supposer directement que la fonction de corrélation binaire garde cette forme en présence d'interactions, ce qui permet ensuite de calculer aisément l'énergie d'interaction. Bien entendu, si cette méthode est riche d'applications et peut s'avérer fort précise dans certains cas, elle repose cependant sur une approximation : lorsque les particules interagissent entre elles, il n'y a aucune raison générale pour que G_2 reste liée à G_1 par cette relation, obtenue en supposant le gaz parfait.

γ . *Fonction de corrélation dépendant du temps*

Comme pour la fonction de corrélation d'ordre un, on peut inclure des dépendances temporelles dans les opérateurs champ, et définir :

$$G_2(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}'_1, t'_1; \mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}'_2, t'_2) = \left\langle \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}_1, t_1) \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}_2, t_2) \Psi(\mathbf{r}'_2, t'_2) \Psi(\mathbf{r}'_1, t'_1) \right\rangle \quad (41)$$

Pour inclure la dépendance en temps, il suffit comme plus haut d'ajouter dans chaque exponentielle spatiale de vecteur d'onde \mathbf{k} une exponentielle du temps avec la fréquence angulaire correspondante $-\omega_k$, ce qui conduit à :

$$\begin{aligned} G_2(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}'_1, t'_1; \mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}'_2, t'_2) &= \\ & \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ [e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_1) - \omega_k(t'_1 - t_1) + \mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_2) - \omega_k(t'_2 - t_2)]} \right. \\ & \left. + \eta e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_1) - \omega_k(t'_2 - t_1) + \mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2) - \omega_k(t'_1 - t_2)]} \right\} f_\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) f_\beta(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \mu) \\ & = G_1(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}'_1, t'_1) \times G_1(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}'_2, t'_2) + \eta G_1(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}'_2, t'_2) \times G_1(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}'_1, t'_1) \end{aligned} \quad (42)$$

Ainsi, lorsque les dépendances en temps sont incluses, on obtient à nouveau une relation de factorisation semblable à (38). Comme plus haut, l'homogénéité dans l'espace et l'invariance par translation dans le temps se manifestent par le fait que seules les différences des variables apparaissent dans l'expression de la fonction de corrélation.

2-c. Fonctions de corrélation d'ordre plus élevé

De façon plus générale¹, la fonction de corrélation G_N d'ordre N est définie par :

$$G_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2; \dots; \mathbf{r}_N, \mathbf{r}'_N) = \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2) \dots \Psi^\dagger(\mathbf{r}_N) \Psi(\mathbf{r}_N) \dots \Psi(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1) \rangle \quad (43)$$

où le nombre d'opérateur champ Ψ à droite est le même que celui d'opérateurs adjoints Ψ^\dagger à gauche. Ces fonctions donnent des informations sur le comportement corrélé de groupes de N particules au sein du gaz parfait à l'équilibre. Le théorème de Wick permet d'exprimer chacune d'entre elles à partir de la fonction de corrélation d'ordre un $G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)$. A titre d'exemple, étudions la fonction de corrélation d'ordre trois :

$$\begin{aligned} G_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2; \mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_3) &= \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2) \Psi^\dagger(\mathbf{r}_3) \Psi(\mathbf{r}'_3) \Psi(\mathbf{r}'_2) \Psi(\mathbf{r}'_1) \rangle \\ &= \frac{1}{L^9} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}''} \sum_{\mathbf{k}'''} \sum_{\mathbf{k}''''} \sum_{\mathbf{k}'''''} \\ &\quad e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'_1 + \mathbf{k}'''' \cdot \mathbf{r}'_2 + \mathbf{k}'''''' \cdot \mathbf{r}'_3 - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}'' \cdot \mathbf{r}_2 - \mathbf{k}'''' \cdot \mathbf{r}_3)} \\ &\quad \times \left\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}''''}^\dagger a_{\mathbf{k}''''''} a_{\mathbf{k}'''''} a_{\mathbf{k}''''} a_{\mathbf{k}'''} a_{\mathbf{k}''} a_{\mathbf{k}} \right\rangle \quad (44) \end{aligned}$$

Six systèmes de contractions interviennent ici dans le calcul des valeurs moyennes. Le premier système est celui où \mathbf{k} et \mathbf{k}' sont associés, \mathbf{k}'' avec \mathbf{k}''' , et enfin \mathbf{k}'''' avec \mathbf{k}''''' ; puis l'on peut permuter les trois vecteurs \mathbf{k}' , \mathbf{k}''' et \mathbf{k}''''' de 5 façons différentes, par des permutations paires ou impaires. Dans chacun des termes ainsi obtenus, la sextuple somme sur les vecteurs d'onde se réduit à une triple somme, de sorte qu'il apparaît un produit de fonctions G_1 . On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} G_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2; \mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_3) &= G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) G_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) G_1(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_3) \\ &\quad + G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_2) G_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_3) G_1(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_1) + G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_3) G_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1) G_1(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_2) \\ &\quad + \eta G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) G_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_3) G_1(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_2) + \eta G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_3) G_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) G_1(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_1) \\ &\quad + \eta G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_2) G_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1) G_1(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}'_3) \quad (45) \end{aligned}$$

Le calcul se généralise de la même façon à des fonctions de corrélation d'ordre quelconque; pour un gaz parfait, elles ne sont pas indépendantes, puisqu'elles se ramènent toutes à de simples produits de fonction de corrélation d'ordre un. En d'autres termes, la fonction G_1 contient donc toutes les informations nécessaires au calcul des corrélations d'ordre quelconque.

On peut enfin calculer la densité triple $G_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ en reportant $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}'_1$, $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}'_2$ et $\mathbf{r}_3 = \mathbf{r}'_3$ dans (45). Le cas particulier $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_3$ où toutes les positions sont confondues est intéressant. Pour des fermions, on constate que la densité triple s'annule. La raison en est la même que plus haut, pour la densité double : le principe d'exclusion de Pauli interdit à plusieurs fermions d'occuper le même point de l'espace. Pour des bosons, on trouve que :

$$G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \mathbf{r}) = 6 [G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r})]^3 \quad (46)$$

1. Nous ne considérons ici que les fonctions de corrélation dites "normales", celles où les Ψ^\dagger précèdent les Ψ . Dans le Complément B_{XVI}, nous introduisons des fonctions de corrélation plus générales.

Pour trois bosons identiques, la tendance au groupement sous l'effet de leur statistique quantique introduit donc un facteur encore plus grand que pour deux bosons, 6 au lieu de 2.

Remarque :

Les résultats que nous avons obtenus sont valables lorsque l'opérateur densité du système est celui que nous avons écrit en (1) pour un gaz parfait à l'équilibre thermique; ils peuvent évidemment être très différents pour un autre état du système. Si par exemple nous supposons (comme dans le Complément A_{XVI}) que le système est décrit par un état de Fock, les relations entre fonctions de corrélations peuvent être complètement changées. Le cas le plus simple est celui d'un gaz parfait de bosons dans l'état fondamental, où tous les bosons occupent le même état individuel; les relations (24) et (25) de ce complément indiquent alors que :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{N-1}{N} G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) \times G_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2) \simeq G_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) \times G_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2) \quad (47)$$

Ainsi, G_2 est alors simplement le produit de deux fonctions G_1 , sans le terme d'échange de (39); en conséquence, le facteur 2 de la seconde ligne de (40) n'existe plus. De même, on verrait que le facteur 6 de (46) est absent. De façon générale, pour un ensemble de bosons occupant tous le même état individuel, les effets de groupement liés à l'indiscernabilité des particules ne sont pas présents.

On notera à ce propos qu'il n'est pas possible d'obtenir le projecteur sur un état de Fock (autre que le vide) comme celui discuté ci-dessus en prenant la limite de l'opérateur densité (1) à l'équilibre thermique lorsque la température T tend vers zéro, c'est-à-dire lorsque $\beta \rightarrow \infty$. La raison est que cet opérateur densité associe à chaque état individuel une distribution des nombres d'occupation qui est toujours une exponentielle décroissante, et jamais une courbe étroite centrée autour d'une valeur élevée du nombre de particules. Il s'ensuit de grandes fluctuations du nombre de particules dans chaque mode, dont l'effet explique la présence des facteurs 2 de (40) et 6 de (46), et ceci quelle que soit la valeur de β .

En conclusion, il est utile de mentionner que le théorème de Wick peut prendre des formes diverses; le lecteur intéressé pourra consulter le Chapitre 4 de la Référence [5]. Ce théorème permet, pour des particules indépendantes, de ramener le calcul des fonctions de corrélation d'ordre arbitraire, dépendantes ou indépendantes du temps, à celui d'un produit de fonctions de corrélations d'ordre un. C'est évidemment une grande simplification. Cette propriété est très semblable à celle des variables aléatoires gaussiennes en statistique classique: pour de telles variables, tous les moments d'ordre quelconque se ramènent à des produits du moment d'ordre le plus bas. Mais ces propriétés sont évidemment spécifiques d'un gaz parfait: pour un système où les particules interagissent, les fonctions de corrélation d'ordres successifs restent a priori indépendantes.

Chapitre XVII

Etats appariés de particules identiques

A	Opérateurs création et annihilation d'une paire de particules	238
A-1	Particules de spin nul, ou dans le même état de spin	238
A-2	Particules dans des états de spin différents	241
B	Construction d'états appariés	242
B-1	Nombre de particules déterminé	242
B-1-a	Particules dans le même état de spin	243
B-1-b	Fermions dans un état singulet	244
B-1-c	Conséquences de la symétrisation	244
B-2	Nombre de particules indéterminé	245
B-2-a	Particules dans le même état de spin	246
B-2-b	Fermions dans un état singulet	246
B-3	Paires de particules et paires d'états individuels	247
C	Propriétés des kets caractérisant les paires d'états	247
C-1	Normalisation	247
C-1-a	Fermions dans un état singulet	248
C-1-b	Bosons dans le même état de spin	249
C-2	Valeur moyenne et écart quadratique du nombre de particules	250
C-2-a	Fermions dans un état singulet	250
C-2-b	Bosons dans le même état de spin	251
C-3	Valeurs moyennes "anormales"	253
C-3-a	Fermions dans un état singulet	254
C-3-b	Bosons dans le même état de spin	254
D	Corrélations entre particules, fonction d'onde de paires	255
D-1	Particules dans le même état de spin	256
D-1-a	Simplifications dues à l'appariement	256
D-1-b	Expression de la fonction de corrélation	257
D-2	Fermions dans un état singulet	259

E Les états appariés comme vide de quasi-particules ; transformations de Bogolubov-Valatin 261

E-1 Transformation des opérateurs de création et annihilation 262

E-2 Effet sur les kets $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ 264

 E-2-a Fermions dans un état singulet 264

 E-2-b Bosons dans le même état de spin 264

E-3 Base d'états excités, quasi-particules 265

Introduction

Les états de Fock ont été introduits au Chapitre XV par action sur le vide d'un produit d'opérateurs de création dans des états individuels. Un certain nombre de leurs propriétés ont été étudiées au § C-5-b- β du Chapitre XV et au Complément A_{XVI} (trou d'échange pour les fermions, groupement pour les bosons). Nous avons également utilisé les états de Fock dans les Compléments C_{XV}, D_{XV} et F_{XV} en tant que kets variationnels pour tenir compte de façon approximative des interactions entre particules ; pour des fermions comme pour des bosons, cela conduit à une théorie de champ moyen, dans le cadre d'une image physique où chaque particule se propage dans le champ moyen créé par toutes les autres.

Le but de ce chapitre est de montrer comment on peut améliorer la précision de ces résultats en introduisant une classe plus large d'états variationnels, afin de prendre en compte un plus grand nombre de propriétés physiques accessibles à un système physique de particules identiques. Il s'agit des "états appariés", qui seront construits en faisant agir sur le vide un produit d'opérateurs de création, non plus de particules individuelles, mais de paires de particules ; si l'on considère que ces particules constituent une molécule, ce sont donc des opérateurs de création de molécules. Les états appariés sont plus généraux que les états de Fock, puisqu'ils permettent d'obtenir les état de Fock pour certaines valeurs des paramètres de la paire, comme nous le verrons au cours de ce chapitre¹. Puisque la classe des états est plus large, il s'agit donc bien d'une amélioration de la méthode variationnelle permettant d'aller plus loin que les états de Fock.

La raison essentielle pour laquelle la souplesse supplémentaire introduite pas les états appariés joue un rôle aussi important est simple : en faisant varier les propriétés de la fonction d'onde de paire $\chi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ qui sert à les construire, on modifie la fonction de corrélation binaire du système de N particules. On tire parti de la puissance de la méthode habituelle du champ moyen, mais, alors que l'utilisation d'états de Fock variationnels ne permet de tenir compte que des corrélations statistiques (dues à l'indiscernabilité des particules), les états appariés permettent d'y ajouter des corrélations dynamiques (dues aux interactions). Or ces corrélations sont essentielles : lorsque les interactions sont binaires (comme c'est le cas avec un hamiltonien standard), ce sont elles qui déterminent la valeur moyenne de l'énergie potentielle (Chapitre XV, § C-5-b). Les corrélations à trois corps, quatre, etc. sont certes présentes dans le système ; elles peuvent parfaitement y jouer un rôle, mais

1. Par exemple, nous préciserons la remarque à la fin du § C-1-a pourquoi la méthode de Hartree-Fock peut être vue comme un cas particulier de celle d'appariement.

n'interviennent pas directement dans l'énergie. Ceci explique pourquoi l'optimisation des seules corrélations binaires par des états appariés peut déjà conduire à des résultats de très bonne qualité dans l'étude des systèmes à N corps. Les possibilités ainsi ouvertes trouvent des applications importantes pour des fermions comme pour des bosons, qui sont discutées dans les compléments.

Ce chapitre est consacré à la mise en place des outils mathématiques utiles pour l'étude des états appariés et de leurs propriétés. Nous étudierons en parallèle fermions et bosons, ce qui permet de voir de nombreuses analogies entre les résultats obtenus dans les deux cas. Dans une première partie (§ A), nous introduisons les opérateurs de création et d'annihilation de particules par paires. Nous construisons ensuite (§ B) les états appariés et discutons quelques-unes de leurs propriétés ; ceci nous permet d'introduire (§ C) les notions de "valeurs moyennes normales" (valeurs moyennes d'opérateurs conservant le nombre de particules) ou "anormales" (valeurs moyennes d'opérateurs changeant le nombre de particules). Au § D nous montrons comment les états appariés permettent effectivement de faire varier les fonctions de corrélation spatiales d'un système de particules identiques ; nous verrons ainsi s'introduire une fonction qui joue un rôle important dans toute la suite (en particulier dans les compléments de ce chapitre), la fonction d'onde de paires ϕ_{paire} , reliée aux valeurs moyennes anormales. Enfin, au § E, nous étudions une autre propriété intéressante des états appariés : ils peuvent être reliés à la notion de "quasi-particule" grâce à l'introduction de nouveaux opérateurs de création et d'annihilation, résultant d'une transformation linéaire des opérateurs initiaux (transformation de Bogolubov) ; les états appariés étant kets propres des nouveaux opérateurs d'annihilation avec la valeur propre nulle, ils apparaissent comme "vide de quasi-particules". De plus, les opérateurs de création permettent d'associer à chaque état apparié toute une base d'autres états orthogonaux, qu'on interprète comme des états peuplés de quasi-particules.

Cette étude des outils permettant de manipuler les états appariés se prolonge dans deux Compléments, A_{XVII} et B_{XVII} . Le Complément A_{XVII} aborde en effet un aspect complémentaire de l'appariement : l'introduction des opérateurs de champ de paires. Ces opérateurs permettent de mettre en évidence les effets coopératifs dans des états appariés, où ces opérateurs prennent une valeur moyenne non nulle. Ceci peut se traduire par l'apparition spontanée d'un paramètre d'ordre dans le système, qui est décrit par la même fonction d'onde de paires ϕ_{paire} que celle qui intervient dans le calcul des fonctions de corrélations dans un état apparié. De plus, nous verrons dans ce Complément A_{XVII} que les propriétés de commutation de ces opérateurs rappellent celles de champ de bosons : dans une certaine mesure, un objet composite formé de deux particules identiques (que ce soient des bosons ou des fermions) se comporte comme un boson. Il s'agit cependant là d'une approximation, comme le montre la présence de termes correctifs ; ces termes apparaissent dans le calcul des commutateurs, et peuvent parfois jouer un rôle important. Le Complément B_{XVII} présente le calcul de la valeur moyenne de l'énergie dans un état apparié, dont l'expression sera le point de départ des compléments qui suivent ; nous y verrons de quelle façon interviennent les valeurs moyennes normales et anormales dans ces calculs.

Les trois derniers compléments appliquent les résultats précédents à l'étude variationnelle des systèmes de bosons ou de fermions en interaction. Pour des fermions, nous verrons au Complément C_{XVII} comment les états appariés jouent un rôle

essentiel dans la théorie BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) des systèmes de fermions attractifs, et permettent de comprendre l'apparition d'un champ de paires par effet collectif; les états appariés interviennent également de façon notable en physique nucléaire et dans l'étude des gaz atomiques de fermions ultra-froids. Pour des bosons répulsifs (Complément E_{XVII}), les états appariés sont également très utiles pour étudier les propriétés de l'état fondamental, et par exemple pour obtenir le spectre linéaire de Bogolubov – dans ce cas l'état apparié sera associé à un autre état (un état cohérent par exemple), dont le rôle est de décrire le condensat par accumulation d'une fraction notable des particules dans un seul état quantique individuel.

A. Opérateurs création et annihilation d'une paire de particules

Introduisons les opérateurs de création ou d'annihilation, non plus d'une particule, mais de deux particules identiques dans un état lié. Nous commençons par supposer les deux particules sans spin (ou occupant toutes deux le même état de spin, de sorte que les variables de spin n'interviennent pas).

A-1. Particules de spin nul, ou dans le même état de spin

Nous considérons deux particules identiques (bosons ou fermions dans le même état de spin), de positions \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 ; le système contenu dans un boîte cubique de côté L et de volume $\mathcal{V} = L^3$. Ces deux particules occupent un état lié caractérisé par une fonction d'onde normée $\chi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, formant donc une sorte de "molécule" binaire. L'état du système est défini par cette fonction d'onde pour ses variables orbitales internes, par des variables de spin égales pour les deux particules (ces dernières ne jouant ici aucun rôle particulier, il est inutile de les écrire explicitement dans ce qui suit), et enfin par ses variables orbitales externes (centre de masse). La fonction d'onde normée d'une "molécule" d'impulsion totale $\hbar\mathbf{K}$ est alors :

$$\begin{aligned} \phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= (L)^{-3/2} e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)/2} \chi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ &= (L)^{-3} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_1} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_2} \end{aligned} \tag{A-1}$$

où $g_{\mathbf{k}}$ est la transformée de Fourier de χ :

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{L^{3/2}} \int_{L^3} d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi(\mathbf{r}) \\ \chi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \tag{A-2}$$

Nous supposons que les fonctions d'onde individuelles des particules sont soumises aux conditions aux limites périodiques (Complément C_{XIV}, § 1.c); dans (A-1), chacune des composantes du vecteur d'onde de la particule 1 ou 2 ne peut alors prendre que les valeurs $2\pi n_x/L$, $2\pi n_y/L$ et $2\pi n_z/L$, où n_x , n_y et n_z sont des nombres entiers quelconques (positifs, négatifs, ou nuls). La normalisation des fonctions χ et g s'écrit :

$$\int_{L^3} d^3r |\chi(\mathbf{r})|^2 = \sum_{\mathbf{k}} |g_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \tag{A-3}$$

De plus, pour des particules identiques, la symétrisation (ou antisymétrisation) impose que $\chi(\mathbf{r})$ et sa transformée de Fourier $g(\mathbf{k})$ aient la parité η :

$$g_{-\mathbf{k}} = \eta g_{\mathbf{k}} \quad (\text{A-4})$$

($\eta = +1$ pour des bosons, $\eta = -1$ pour des fermions).

En termes de kets, la relation (A-1) devient :

$$\begin{aligned} |\phi_{\mathbf{K}}(1, 2)\rangle &= (L)^{-3} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_1} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_2} |1 : \mathbf{r}_1; 2 : \mathbf{r}_2\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \left| 1 : \left(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k} \right); 2 : \left(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A-5})$$

qui, compte tenu de (A-4) et d'un changement de signe de la variable de sommation \mathbf{k} , peut également s'écrire :

$$\begin{aligned} |\phi_{\mathbf{K}}(1, 2)\rangle &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \left[\left| 1 : \left(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k} \right); 2 : \left(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k} \right) \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \eta \left| 1 : \left(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k} \right); 2 : \left(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k} \right) \right\rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{A-6})$$

L'expression qui figure au second membre dans le crochet sous la somme n'est autre que le ket (anti)symétrisé de deux particules, l'une d'impulsion $\hbar(\mathbf{k} + \mathbf{K}/2)$, l'autre d'impulsion $\hbar(-\mathbf{k} + \mathbf{K}/2)$. Nous distinguons alors deux cas :

(i) Si $\mathbf{k} \neq 0$, pour normer le ket entre crochets, il faut le diviser par $\sqrt{2}$; on obtient alors un état de Fock où deux états individuels d'impulsions différentes sont peuplés. Le ket dans le crochet est donc égal à :

$$\sqrt{2} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}}^\dagger |0\rangle \quad (\text{A-7})$$

(ii) Si $\mathbf{k} = 0$, pour des bosons le ket entre crochets est le double d'un état de Fock où un seul niveau individuel est peuplé de deux particules; ce ket est égal à :

$$\sqrt{2} \left(a_{\frac{\mathbf{K}}{2}}^\dagger \right)^2 |0\rangle \quad (\text{A-8})$$

Pour des fermions, le ket entre crochets est nul, ce qui est également le cas du ket (A-8). Pour finir, qu'il s'agisse de fermions ou de bosons, et que \mathbf{k} soit nul ou non, le ket entre crochets est donc toujours égal à l'expression (A-7). Il vient alors :

$$|\phi_{\mathbf{K}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}}^\dagger |0\rangle \quad (\text{A-9})$$

S'il s'agit de particules toutes dans le même état de spin, rappelons que dans cette expression l'indice de spin est sous-entendu : chacun des opérateurs de création est relatif à un état individuel dont l'impulsion est spécifiée par l'indice de l'opérateur, et dont l'état de spin est celui commun à toutes les particules.

L'opérateur de création $A_{\mathbf{K}}^\dagger$ d'une "molécule" d'impulsion totale $\hbar\mathbf{K}$ s'écrit ainsi :

$$A_{\mathbf{K}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}}^\dagger \quad (\text{A-10})$$

Son effet est donc de créer deux particules d'impulsions $\hbar [(\mathbf{K}/2) \pm \mathbf{k}]$, avec des amplitudes données par la fonction $g_{\mathbf{k}}$. La parité de cette fonction étant η , on remarque que :

$$g_{-\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}}^\dagger = \eta g_{\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}}^\dagger = g_{\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}}^\dagger \quad (\text{A-11})$$

Il s'ensuit que les contributions des valeurs opposées de \mathbf{k} se doublent dans (A-10). Or une telle redondance se révélera gênante au § B-2, lorsque nous écrirons un produit tensoriel. Il est donc préférable de l'éliminer dès maintenant. Pour cela nous allons restreindre la sommation sur \mathbf{k} à un demi-espace D des nombres d'onde, et écrire $A_{\mathbf{K}}^\dagger$ sous la forme :

$$A_{\mathbf{K}}^\dagger = \sqrt{2} \sum_{\mathbf{k} \in D} g_{\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}}^\dagger \quad (\text{A-12})$$

Pour une "molécule" d'impulsion totale nulle, cette relation devient :

$$A_{\mathbf{K}=\mathbf{0}}^\dagger = \sqrt{2} \sum_{\mathbf{k} \in D} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger \quad (\text{A-13})$$

Quant à l'opérateur d'annihilation d'une "molécule" d'impulsion totale $\hbar \mathbf{K}$, il est simplement l'adjoint de (A-12) :

$$A_{\mathbf{K}} = \sqrt{2} \sum_{\mathbf{k} \in D} g_{\mathbf{k}}^* a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}} \quad (\text{A-14})$$

Nous avons raisonné en termes de "molécules" créées ou annihilées, mais la fonction d'onde $\chi(\mathbf{r})$ et sa transformée de Fourier $g_{\mathbf{k}}$ ne se réfèrent à aucun état lié particulier, ni même à l'existence d'un potentiel d'attraction quelconque entre les deux constituants de cette "molécule". En fait, dans ce qui suit, les $g_{\mathbf{k}}$ joueront plutôt le rôle de paramètres librement ajustables, par exemple dans le cadre d'une méthode variationnelle. Pour tenir compte de cette généralité, nous parlerons donc plutôt de "paires" à partir de maintenant.

Remarques :

Si l'on choisit pour $g_{\mathbf{k}}$ un delta de Kronecker :

$$g_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0} \quad (\text{A-15})$$

on obtient d'après (A-12) :

$$A_{\mathbf{K}}^\dagger = a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}_0}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}_0}^\dagger \quad (\text{A-16})$$

Dans le second membre de cette relation, les impulsions qui figurent en indice des opérateurs de création peuvent être ajustées à des valeurs quelconques : il suffit pour cela de faire varier \mathbf{K} et \mathbf{k}_0 . Il est ainsi possible, par un choix particulier des paramètres de la paire, de créer deux particules dans des états individuels d'impulsions quelconques, et donc d'obtenir un état de Fock. Par application successive de P opérateurs $A_{\mathbf{K}}^\dagger$ (avec des valeurs de \mathbf{K} et de \mathbf{k}_0 qui ne sont pas en général les mêmes), on peut ainsi obtenir n'importe quel état de Fock de $2P$ particules avec des impulsions quelconques.

A-2. Particules dans des états de spin différents

Nous supposons que l'état interne de la paire est un produit tensoriel d'un état orbital dépendant de $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ et d'un état de spin $|\chi_S\rangle$. L'équation (A-1) est alors remplacée par :

$$\begin{aligned}\phi_{\mathbf{K}}^{\nu_1, \nu_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \langle 1 : \mathbf{r}_1, \nu_1; 2 : \mathbf{r}_2, \nu_2 | \Psi_{\mathbf{K}} \rangle \\ &= (L)^{-3/2} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2} \chi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \langle \nu_1, \nu_2 | \chi_S \rangle \\ &= (L)^{-3} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_1} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_2} \langle \nu_1, \nu_2 | \chi_S \rangle\end{aligned}\quad (\text{A-17})$$

Il faut donc multiplier (A-1) par $\langle \nu_1, \nu_2 | \chi_S \rangle$; la relation (A-5) devient alors :

$$\begin{aligned}|\phi_{\mathbf{K}}(1, 2)\rangle &= (L)^{-3} \sum_{\mathbf{k}} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_1} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_2} \\ &\quad \times \sum_{\nu_1, \nu_2} \langle \nu_1, \nu_2 | \chi_S \rangle |1 : \mathbf{r}_1, \nu_1; 2 : \mathbf{r}_2, \nu_2\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \sum_{\nu_1, \nu_2} \langle \nu_1, \nu_2 | \chi_S \rangle \left| 1 : \left(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k} \right), \nu_1; 2 : \left(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k} \right), \nu_2 \right\rangle\end{aligned}\quad (\text{A-18})$$

Nous supposons que la fonction $\chi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ a une parité orbitale η_o , que le ket de spin $|\chi_S\rangle$ a une parité η_s par échange des spins, et bien sûr que :

$$\eta_o \eta_s = \eta \quad (\text{A-19})$$

Alors :

$$\begin{aligned}|\phi_{\mathbf{K}}(1, 2)\rangle &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \sum_{\nu_1, \nu_2} \langle \nu_1, \nu_2 | \chi_S \rangle \left\{ \left| 1 : \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}, \nu_1; 2 : \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}, \nu_2 \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \eta \left| 1 : \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}, \nu_2; 2 : \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}, \nu_1 \right\rangle \right\}\end{aligned}\quad (\text{A-20})$$

ce qui montre que l'opérateur de création d'une paire est :

$$A_{\mathbf{K}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \sum_{\nu_1, \nu_2} \langle \nu_1, \nu_2 | \chi_S \rangle a_{\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}, \nu_1}^{\dagger} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}, \nu_2}^{\dagger} \quad (\text{A-21})$$

Par exemple, pour deux fermions de spin 1/2 dans un état singulet, nous avons :

$$A_{\mathbf{K}}^{\dagger} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \left[a_{\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}, \nu=+}^{\dagger} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}, \nu=-}^{\dagger} - a_{\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}, \nu=-}^{\dagger} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}, \nu=+}^{\dagger} \right] \quad (\text{A-22})$$

Puisque $\eta_s = -1$, les fonctions $\chi(\mathbf{r})$ et $g_{\mathbf{k}}$ sont paires. Utilisant cette parité, nous pouvons changer l'indice muet \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$ dans le second terme du membre de droite, et changer l'ordre des deux opérateurs de création, moyennant un changement de

signe (anticommutation des opérateurs fermioniques). Ce second terme double alors le premier, et il vient :

$$A_{\mathbf{K}}^{\dagger} = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \quad (\text{A-23})$$

avec la simplification de notation que nous utiliserons à partir de maintenant :

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k},\nu=+} & \quad \text{noté :} & a_{\mathbf{k},\uparrow} \\ a_{\mathbf{k},\nu=-} & \quad \text{noté :} & a_{\mathbf{k},\downarrow} \end{aligned} \quad (\text{A-24})$$

(et, bien sûr, des notations semblables pour les opérateurs de création a^{\dagger}). On remarque au passage que, du fait de la présence des spins, aucune redondance n'est présente dans la sommation de (A-23), de sorte qu'il n'y a pas lieu de la restreindre à un demi-espace.

Remarques :

- (i) Si l'on choisit $g_{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}_0}$ on voit, comme plus haut, qu'il est possible de construire n'importe quel état de Fock d'impulsions quelconques par application successive d'opérateurs $A_{\mathbf{K}}^{\dagger}$ sur le vide ; il faut toutefois que les nombres d'occupation totaux des deux états de spin soient égaux.
- (ii) Si l'on choisit une fonction $g_{\mathbf{k}}$ impaire au lieu de paire, l'opérateur écrit en (A-23) crée une paire de fermions dans l'état de spin total $S = 1$ de composante $M = 0$. En effet, si l'on remplace le signe moins au milieu du crochet de (A-22) par un signe plus, et si l'on utilise le fait que $g_{\mathbf{k}}$ est maintenant impaire, on arrive par le même raisonnement à (A-23).

B. Construction d'états appariés

Nous allons construire des états appariés $|\Psi_P\rangle$ aussi simples que possible, le but étant évidemment d'éviter des calculs trop compliqués. Nous allons pour cela nous inspirer de la méthode variationnelle de Gross-Pitaevskii (Complément C_{XV}), où nous avons supposé que l'état du système à N particules pouvait être obtenu à partir du vide en créant N particules dans le même état individuel. Ici aussi nous allons appliquer au vide de particules un grand nombre de fois le même opérateur de création mais, au lieu que ce soit l'opérateur $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ correspondant à une seule particule, ce sera celui $A_{\mathbf{K}}^{\dagger}$ d'une création de paires. Cette différence est essentielle, en particulier pour des fermions : il serait impossible de mettre plusieurs fermions dans le même état quantique individuel, puisque le carré, le cube, etc. de tout opérateur de création agissant sur un état individuel donné est nul. Mais nous allons voir que la création de P paires de fermions toutes dans le même état quantique ne conduit pas à un vecteur d'état nul.

B-1. Nombre de particules déterminé

L'état apparié $|\Psi_P(\mathbf{K})\rangle$ est donc défini comme un vecteur d'état (non normé) où $N = 2P$ particules forment P paires, chaque paire ayant l'impulsion totale $\hbar\mathbf{K}$:

$$|\Psi_P(\mathbf{K})\rangle = \left[A_{\mathbf{K}}^{\dagger} \right]^P |0\rangle \quad (\text{B-1})$$

où $A_{\mathbf{k}}^\dagger$ est défini en (A-12) ou en (A-23), selon le cas. Nous supposons dans ce qui suit que toutes les paires créées ont une impulsion totale nulle ; si ce n'est pas le cas, on peut simplement se ramener à ce cas en effectuant un changement de repère galiléen (afin d'utiliser celui où la valeur commune de l'impulsion de toutes les paires de particules s'annule). L'état apparié $|\Psi_P\rangle$ est alors :

$$|\Psi_P\rangle = \left[A_{\mathbf{k}=0}^\dagger \right]^P |0\rangle \quad (\text{B-2})$$

Comme au § A-1, nous allons commencer par l'étude du cas où le système physique étudié est constitué de bosons ou fermions dans le même état de spin. A partir de maintenant, nous allons cependant restreindre l'étude du § A-2 (particules dans plusieurs états de spin) à celle de fermions dans un état singulet ; ceci nous permettra d'éviter des calculs plus lourds, dont le principe resterait cependant le même.

Dans les deux cas, les seuls paramètres dont dépend cet état à $2P$ particules sont les valeurs de $g_{\mathbf{k}}$. Dès que $P > 1$, nous vérifierons que la normalisation du ket $|\Psi_P(\mathbf{K})\rangle$ ne se ramène pas à la simple condition (A-3), qui imposait que la somme des $|g_{\mathbf{k}}|^2$ soit égale à l'unité. C'est pourquoi, à partir de maintenant, nous considérons les $g_{\mathbf{k}}$ comme des paramètres variationnels totalement libres ; en les multipliant par exemple tous par une même constante, on peut alors faire varier à loisir la norme de $|\Psi_P(\mathbf{K})\rangle$. Nous verrons que ceci fournit une flexibilité qui rend les calculs plus aisés.

B-1-a. Particules dans le même état de spin

Pour des particules dans le même état de spin, on peut utiliser (A-13) qui conduit à :

$$|\Psi_P\rangle = \left\{ \sum_{\mathbf{k} \in D} \sqrt{2} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger \right\}^P |0\rangle \quad (\text{B-3})$$

où D est le domaine de sommation défini plus haut (demi-espace de l'espace des \mathbf{k}) ; rappelons que le système physique est supposé contenu dans un boîte cubique de côté L et de volume $\mathcal{V} = L^3$; les conditions aux limites périodiques fixent alors les valeurs possibles de la sommation sur \mathbf{k} . Rappelons que l'indice de spin est sous-entendu : $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ est l'opérateur de création dans l'état individuel défini par l'impulsion $\hbar\mathbf{k}$ et par l'état unique de spin en question.

Initialement, les paramètres $g_{\mathbf{k}}$ dont dépend le ket $|\Psi_P\rangle$ ont été introduits comme les composantes de Fourier de la fonction d'onde de paires normée $\chi(\mathbf{r})$, la somme de leurs modules au carré étant égale à l'unité. Mais cette condition n'assure en rien la normalisation de $|\Psi_P\rangle$. En effet, si l'on développe la puissance P de l'opérateur qui apparaît dans (B-3), des facteurs contenant des racines carrées des nombres d'occupation s'introduisent chaque fois que l'indice \mathbf{k} est répété ; le ket $|\Psi_P\rangle$ n'est donc pas un simple produit tensoriel, et sa norme n'est pas simplement la somme de modules au carré des $g_{\mathbf{k}}$ élevée à la puissance P . En fait, il s'avère plus simple pour la suite de ne pas imposer de normalisation à cet état et de considérer les $g_{\mathbf{k}}$ comme des paramètres entièrement libres.

On peut, au choix, prendre un nombre fini ou infini de $g_{\mathbf{k}}$ non nuls. Le cas le plus simple est celui, déjà envisagé plus haut, où $g_{\mathbf{k}} \propto \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}_0}$; le ket $|\Psi_P\rangle$ devient alors proportionnel à un simple état de Fock où seuls deux états d'impulsions opposées

sont peuplés. Pour d'autres fonctions $g_{\mathbf{k}}$, la structure du vecteur d'état apparié est plus complexe ; la variation de ces paramètres permet de moduler les propriétés de corrélation entre particules de façon plus fine que dans un simple état de Fock.

B-1-b. Fermions dans un état singulet

Un autre cas fréquent est celui où les particules sont des fermions dans un état singulet, de sorte qu'il faut appliquer l'opérateur (A-23). L'état apparié est alors :

$$|\Psi_P\rangle = \left[A_{\mathbf{K}=0}^\dagger \right]^P |0\rangle = \left\{ \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right\}^P |0\rangle \quad \text{avec } N = 2P \quad (\text{B-4})$$

La sommation sur \mathbf{k} s'effectue ici sur tous les vecteurs d'onde non nuls, sans la restriction de (B-3) à un demi-espace D (la présence des spins fait que les couples d'états $\mathbf{k}, \uparrow, -\mathbf{k}, \downarrow$ et $-\mathbf{k}, \uparrow, \mathbf{k}, \downarrow$ sont distincts).

Ici aussi on constate que la normalisation de $|\Psi_P\rangle$ ne se ramène pas à la simple condition (A-3). En effet, lorsque que $P > 1$, le même indice \mathbf{k} peut apparaître deux fois (ou plus) dans le développement de la puissance P de l'opérateur au second membre de (B-4) ; la composante correspondante s'annule puisque le carré de tout opérateur de création fermionique est nul. L'expression de la norme du ket $|\Psi_P\rangle$ est donc compliquée. Plutôt que de le normaliser, il est plus simple de laisser sa norme varier, ce qui conduit ici aussi à considérer les $g_{\mathbf{k}}$ comme des paramètres variationnels entièrement libres.

B-1-c. Conséquences de la symétrisation

Les vecteurs d'état (B-3) pour des bosons, et (B-4) pour des fermions, ne décrivent pas simplement la juxtaposition de P paires de particules dont chacune serait décrite par la fonction d'onde relative $\chi(\mathbf{r})$, de transformée de Fourier $g(\mathbf{k})$ selon (A-2). Nous avons déjà vu que la norme des états appariés à $2P$ particules est fortement affectée par la symétrisation ou l'antisymétrisation de cet état ; elles jouent également un rôle absolument essentiel dans la structure même du vecteur d'état, qui n'a rien d'un produit tensoriel de P états de paires. C'est particulièrement clair dans le cas des fermions : si l'on développe la puissance P de la somme d'opérateurs dans l'accolade de (B-4), il apparaît le produit de P sommes sur des indices $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_P$, où de nombreux termes s'annulent : tous ceux pour lesquels deux (ou plus) indices de sommation \mathbf{k} sont égaux (les carrés d'opérateurs de création, nuls pour des fermions).

Il existe cependant un cas limite où l'état apparié décrit pratiquement la juxtaposition de P molécules binaires : celui où la portée de la fonction d'onde $\chi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ est très faible, de sorte que ses composantes de Fourier $g_{\mathbf{k}}$ sont très nombreuses ; lorsque le nombre de composantes significatives est bien plus grand que le nombre de paires P , pour la plupart des termes il n'y a pas de répétition entre les indices de sommation \mathbf{k} , de sorte que le vecteur d'état apparié n'est pas très différent d'un produit tensoriel de paires de particules. Il décrit alors un gaz effectivement constitué de molécules binaires fortement liées, chacune se déplaçant dans le champ moyen de toutes les autres (en quelque sorte, un état de Fock de molécules). Mais ce n'est qu'un cas particulier ; en général et avec une fonction d'onde de paire quelconque, on peut traiter bien d'autres situations physiques, et c'est ce qui fait tout l'intérêt des états appariés.

Ainsi, alors que mathématiquement les valeurs de $g_{\mathbf{k}}$ ou la fonction d'onde $\chi(\mathbf{r})$ d'une "molécule" constituent l'ingrédient de départ qui permet de construire $|\Psi_P\rangle$, l'état résultant après symétrisation possède en général une structure complexe qui n'est guère descriptible en termes de molécules. En revanche, cet état conserve une propriété simple : contenir exactement $N = 2P$ particules, puisque c'est le cas pour toutes ses composantes non nulles ; toutes les particules étant appariées, il contient exactement P paires de particules.

B-2. Nombre de particules indéterminé

Sous la forme où nous avons écrit $|\Psi_P\rangle$, les calculs qu'il permet (en particulier sa normalisation) ne sont pas aisés : dans l'accolade apparaissent de très nombreux états individuels \mathbf{k} , et il nous faut élever cette accolade à une puissance P très grande. Cette difficulté pratique conduit à introduire un autre état variationnel $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ où le nombre total de particules n'est plus fixé. Ce nouvel état, qui permet des calculs plus aisés², est défini à partir de (B-2) par :

$$|\Psi_{\text{app}}\rangle = \sum_{P=0}^{\infty} \frac{1}{P!} |\Psi_P\rangle = \sum_{P=0}^{\infty} \frac{1}{P!} \left[A_{\mathbf{K}=0}^\dagger \right]^P |0\rangle \quad (\text{B-5})$$

Les $|\Psi_P\rangle$ ne sont pas normalisés ; en multipliant tout les $g_{\mathbf{k}}$, et donc $A_{\mathbf{K}=0}$, par une même constante α , on peut multiplier leur norme par α^P . Ce faisant, on change le poids relatif des termes de la série (B-5). Plus α est grand, plus les valeurs élevées de P prennent un poids important, ce qui permet par exemple de faire varier le nombre moyen de particules.

Dans (B-5) apparaît le développement d'une exponentielle, de sorte que :

$$|\Psi_{\text{app}}\rangle = \exp \left\{ A_{\mathbf{K}=0}^\dagger \right\} |0\rangle \quad (\text{B-6})$$

Cette propriété va apporter une grande simplification dans les calculs qui vont suivre ; c'est la raison principale qui pousse à laisser le nombre total de particules fluctuer.

En écrivant (B-5), nous avons choisi un vecteur d'état qui superpose des états correspondant à des nombres totaux N de particules qui sont différents, alors qu'aucun processus physique pris en compte dans notre approche ne peut créer une telle superposition cohérente. Cette opération rappelle le passage de l'ensemble canonique au grand-canonique, où l'on introduit par commodité mathématique un mélange statistique (incohérent) de différentes valeurs de N . Mais ici il s'agit d'une superposition cohérente, et l'introduire arbitrairement comme nous l'avons fait ne change-t-il pas complètement la physique du problème ? En fait, ce n'est pas le cas, et ce pour deux raisons. La première est que, lorsque N est très grand, nous vérifierons que les composantes de $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ ne sont importantes que dans un domaine de N de largeur très petite par rapport à la valeur moyenne du nombre de particules ; la distribution des valeurs possibles de N est donc étroite en valeur relative, et le nombre de particules reste très bien défini. La seconde est que nous allons procéder au calcul de la valeur moyenne d'opérateurs qui, comme \hat{H} , conservent le nombre total de particules, et sont donc insensibles aux cohérences du vecteur d'état entre kets de N différents.

2. Les calculs avec un état variationnel à nombre fixé de particules ne sont pas pour autant impossibles, comme le montre par exemple le traitement de la théorie BCS dans le § 5.4 et l'appendice 5C de l'ouvrage [8]

La valeur moyenne dans l'état cohérent $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ est donc une simple pondération des valeurs moyennes obtenues pour chaque N qui, lorsque la valeur moyenne du nombre des particules est très élevée, sont approximativement les mêmes du fait de l'étroitesse de la distribution en N . En d'autres termes, les valeurs moyennes que nous allons calculer sont de bonnes approximations de celles que l'on obtiendrait en projetant $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ sur l'une de ses principales composantes de N fixé ; l'utilisation de la superposition cohérente (B-5) apporte donc une grande commodité mathématique, sans pour autant perturber gravement les résultats physiques. Nous revenons plus en détail sur cette question dans le § 1 du Complément B_{XVII}.

B-2-a. Particules dans le même état de spin

Pour des particules toutes dans le même état de spin, l'insertion de (A-13) dans (B-6) conduit à :

$$|\Psi_{\text{app}}\rangle = \exp \left\{ \sum_{\mathbf{k} \in D} \sqrt{2} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right\} |0\rangle \tag{B-7}$$

Mais les opérateurs $a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}$ et $a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}'}$ commutent (pour des fermions dans le même état de spin, deux signes moins se compensent lors de la commutation de produits de deux opérateurs). Il s'ensuit que l'exponentielle de la somme est un produit d'exponentielles, de sorte que :

$$\begin{aligned} |\Psi_{\text{app}}\rangle &= \left\{ \prod_{\otimes \mathbf{k} \in D} \exp \left[\sqrt{2} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right] \right\} |0\rangle \\ &= \prod_{\otimes \mathbf{k} \in D} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle \end{aligned} \tag{B-8}$$

Le vecteur d'état $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ est donc simplement un produit tensoriel³ de vecteurs d'état $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$:

$$|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \exp \left\{ \sqrt{2} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right\} |0\rangle \tag{B-9}$$

Pour des fermions dans un seul état de spin, le carré de tout opérateur de création est nul ; l'exponentielle se réduit donc à la somme des deux premiers termes de son développement :

$$|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \left[1 + \sqrt{2} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right] |0\rangle \quad (\text{fermions seulement}) \tag{B-10}$$

B-2-b. Fermions dans un état singulet

Pour des fermions appariés dans un état singulet, l'état $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ sera appelé "état BCS" (Complément C_{XVII}) et noté $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle$; il faut utiliser la relation (A-23)

3. L'espace de Fock est le produit tensoriel des états associés aux divers états quantiques individuels $|\mathbf{k}\rangle$, dont chaque nombre d'occupation prend une valeur entière positive quelconque. On peut également regrouper ces espaces par couples de valeurs opposées de \mathbf{k} , et introduire ainsi des espaces $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ dont l'espace de Fock est également le produit tensoriel. Dans chacun de ces espaces, une base est engendrée en faisant varier deux nombres d'occupation.

La restriction de la somme sur \mathbf{k} à un demi-espace D , introduite plus haut, permet d'éviter de faire apparaître deux fois chaque composante du produit tensoriel dans (B-8).

avec $\mathbf{K} = 0$. Comme l'exponentielle d'une somme d'opérateurs qui commutent⁴ est un produit d'opérateurs, nous obtenons :

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \exp \left\{ \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right\} |0\rangle = \prod_{\otimes \mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{B-11})$$

avec :

$$|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \exp \left[g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right] |0\rangle \quad (\text{B-12})$$

Comme le carré de tout opérateur de création de fermions donne zéro, le développement en puissances de l'exponentielle se limite à ses deux premiers termes, et :

$$|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \left[1 + g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right] |0\rangle \quad (\text{B-13})$$

B-3. Paires de particules et paires d'états individuels

Une notion importante est celle de *paires d'états*, à ne pas confondre avec celle de paires de particules. Dans (B-7) comme dans (B-11), les états individuels interviennent tous par "paires d'états" (\mathbf{k} , $-\mathbf{k}$). Le nombre de ces paires (qui est d'ailleurs infini si D l'est) n'est pas relié au nombre de particules. Pour des fermions dans un état singulet, il est commode de repérer la paire d'états par l'impulsion \mathbf{k} associée à l'état de spin \uparrow , étant entendu que l'impulsion associée à l'état de spin \downarrow est l'opposée $-\mathbf{k}$. Nous utiliserons systématiquement cette simplification dans ce qui suit.

C. Propriétés des kets caractérisant les paires d'états

Etudions quelques propriétés des états $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$ qui seront utiles pour la suite. Pour simplifier, dans ce § C nous restreignons un peu plus la généralité des calculs en supposant que les particules dans un même état de spin sont des bosons ; quant aux particules dans des états de spin différents, nous continuerons à prendre pour exemple des fermions dans un état de spin singulier. La généralisation à d'autres cas d'appariement ne présente cependant aucune difficulté particulière.

C-1. Normalisation

Il se trouve qu'il est commode de commencer ici par les fermions, car ils conduisent à une normalisation plus simple des états $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$; la raison en est est que, comme nous allons le voir, le développement de l'exponentielle (B-12) ne contient que deux termes lorsqu'il s'agit de fermions, au lieu d'une infinité pour des bosons. C'est pourquoi, dans ce § C, nous renversons provisoirement du l'ordre du § A et étudions en premier les fermions de spin $1/2$.

4. Les opérateurs $a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger}$ et $a_{\mathbf{k}',\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}',\downarrow}^{\dagger}$ relatifs à des paires différentes commutent, puisque ce sont des produits de deux opérateurs fermioniques.

C-1-a. Fermions dans un état singulet

Nous prenons le parti de normaliser séparément chacun des $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$ en le multipliant par un nombre $u_{\mathbf{k}}$. Nous multiplions donc le ket $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$ écrit en (B-13) par $u_{\mathbf{k}}$, ce qui revient à le remplacer par :

$$|\overline{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = \left[u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right] |0\rangle \tag{C-1}$$

avec :

$$v_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \tag{C-2}$$

La condition de normalisation devient :

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \tag{C-3}$$

Il devient alors naturel de poser :

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \cos \theta_{\mathbf{k}} e^{-i\zeta_{\mathbf{k}}} \\ v_{\mathbf{k}} &= \sin \theta_{\mathbf{k}} e^{i\zeta_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \tag{C-4}$$

où $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$ sont les deux variables⁵ dont dépend le ket $|\overline{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$. On peut choisir $\theta_{\mathbf{k}}$ entre 0 et $\pi/2$:

$$0 \leq \theta_{\mathbf{k}} \leq \frac{\pi}{2} \tag{C-5}$$

de sorte que $\cos \theta_{\mathbf{k}}$ et $\sin \theta_{\mathbf{k}}$ soient positifs et représentent les modules de $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$. Nous avons vu au § A-2 que $g_{\mathbf{k}} = g_{-\mathbf{k}}$; les fonctions $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$ sont donc paires en \mathbf{k} .

Le ket variationnel $|\overline{\Psi}_{BCS}\rangle$ devient alors le ket normé $|\overline{\Psi}_{BCS}\rangle$:

$$\begin{aligned} |\overline{\Psi}_{BCS}\rangle &= \prod_{\otimes \mathbf{k}} \left[u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right] |0\rangle \\ &= \prod_{\otimes \mathbf{k}} \left[\cos \theta_{\mathbf{k}} e^{-i\zeta_{\mathbf{k}}} + \sin \theta_{\mathbf{k}} e^{i\zeta_{\mathbf{k}}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right] |0\rangle \end{aligned} \tag{C-6}$$

Remarque :

Un cas particulier est celui où tous les $\theta_{\mathbf{k}}$ sont, soit nuls, soit égaux à $\pi/2$. Le ket $|\overline{\Psi}_{BCS}\rangle$ se réduit alors à un simple état de Fock, dont les populations des niveaux individuels sont soit nulles, soit égales à l'unité (celles des états appartenant à une paire pour laquelle $\theta_{\mathbf{k}} = \pi/2$). Dans ce cas, les phases $\zeta_{\mathbf{k}}$ ne jouent plus aucun rôle : au lieu de fixer une phase relative, elles ne déterminent que la phase globale du vecteur d'état.

Si de plus l'on choisit $\theta_{\mathbf{k}} = \pi/2$ pour toutes les valeurs de \mathbf{k} dont le module est inférieur à une valeur arbitraire donnée k_F , nulles sinon, l'état apparié décrit alors un ensemble de fermions remplissant deux sphères de Fermi (une par état de spin), qui n'est autre que l'état fondamental d'un gaz parfait de fermions. Le ket $|\overline{\Psi}_{BCS}\rangle$ se réduit alors au ket d'essai de la méthode de Hartree-Fock du Complément B_{XV}; cette dernière apparaît alors comme un cas particulier de la méthode plus générale d'appariement utilisée dans ce chapitre.

5. La variable $\zeta_{\mathbf{k}}$ détermine la différence $2\zeta_{\mathbf{k}}$ entre les phases de $v_{\mathbf{k}}$ et $u_{\mathbf{k}}$. Nous pourrions également introduire une variable pour déterminer leur somme, mais cela serait inutile : une telle variable ne ferait que changer la phase totale du ket $|\overline{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$, sans conséquence physique.

C-1-b. Bosons dans le même état de spin

Pour des bosons, nous allons voir que les résultats sont un peu différents ; pour conserver une certaine analogie, nous utiliserons les mêmes paramètres $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$ que pour les fermions, mais ce sont maintenant des sinus et cosinus hyperboliques des $\theta_{\mathbf{k}}$ qui vont intervenir. La relation (B-9) conduit à :

$$|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{1}{q!} \left[\sqrt{2} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right]^q |0\rangle = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{1}{q!} [-x_{\mathbf{k}}]^q \left[a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right]^q |0\rangle \quad (\text{C-7})$$

avec⁶ :

$$x_{\mathbf{k}} = -\sqrt{2} g_{\mathbf{k}} \quad (\text{C-8})$$

Comme précédemment l'indice de spin, qui s'adjoint à l'indice \mathbf{k} , est sous-entendu puisqu'il prend toujours la même valeur. En conséquence :

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle &= \sum_{q=0}^{\infty} \left(\frac{1}{q!} \right)^2 |x_{\mathbf{k}}|^{2q} \left(\sqrt{q!} \right)^4 = \sum_{q=0}^{\infty} |x_{\mathbf{k}}|^{2q} \\ &= \frac{1}{1 - |x_{\mathbf{k}}|^2} \end{aligned} \quad (\text{C-9})$$

Nous avons supposé pour sommer la série que :

$$|x_{\mathbf{k}}|^2 < 1 \quad (\text{C-10})$$

Il est alors commode pour la suite de caractériser la variable complexe $x_{\mathbf{k}}$ par deux variables réelles : $\theta_{\mathbf{k}}$ qui caractérise son module, et un angle $\zeta_{\mathbf{k}}$ qui caractérise sa phase. Nous posons donc :

$$x_{\mathbf{k}} = \text{th}\theta_{\mathbf{k}} e^{2i\zeta_{\mathbf{k}}} \quad \text{avec : } \theta_{\mathbf{k}} \geq 0 \quad (\text{C-11})$$

La contrainte (C-10) est automatiquement satisfaite, puisque le module d'une tangente hyperbolique est toujours inférieur à 1 ; comme la fonction $g_{\mathbf{k}}$ est paire – cf. relation (A-4) – il en est de même de $x_{\mathbf{k}}$ et des fonctions⁷ $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$. On a alors :

$$\langle \varphi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{1 - \text{th}^2\theta_{\mathbf{k}}} = \text{ch}^2\theta_{\mathbf{k}} \quad (\text{C-12})$$

Les kets normalisés $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ peuvent donc s'écrire :

$$|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\text{ch}\theta_{\mathbf{k}}} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\text{ch}\theta_{\mathbf{k}}} \exp \left[-x_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right] |0\rangle \quad (\text{C-13})$$

Si l'on substitue les $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ aux $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$, le ket $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ devient normalisé à 1.

Initialement, les kets $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$ ainsi que leurs versions normalisées $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ n'ont été définis dans le produit tensoriel (B-8) que lorsque \mathbf{k} appartient au demi-espace D . Les relations (C-7) et (C-13) permettent cependant de les définir quel que soit \mathbf{k} ; on a alors simplement $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = |\bar{\varphi}_{-\mathbf{k}}\rangle$, ce qui est naturel puisque $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ concerne de la même façon les deux états individuels \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$.

6. Le signe moins de cette définition est arbitraire – un changement de signe de la fonction d'onde $\chi(\mathbf{r})$ ou de sa transformée de Fourier $g_{\mathbf{k}}$ est sans conséquences physiques – mais il se trouve qu'il est commode d'introduire ce signe dans l'exposant de (B-9) pour assurer la cohérence avec les calculs du § E.

7. De plus, l'invariance par rotation impose généralement que ces fonctions ne dépendent que du module k de \mathbf{k} .

C-2. Valeur moyenne et écart quadratique du nombre de particules

Le nombre de particules dans l'état individuel \mathbf{k} correspond à l'opérateur :

$$\hat{n}_{\mathbf{k}} = a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \quad (\text{C-14})$$

Nous allons maintenant calculer la valeur moyenne et l'écart quadratique moyen du nombre de particules, d'abord dans une paire d'états donnée, ensuite dans l'ensemble du système.

C-2-a. Fermions dans un état singulet

Calculons la valeur moyenne du nombre de particules dans l'état apparié $|\overline{\Psi}_{BCS}\rangle$, qui est le produit tensoriel des états $|\overline{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ associés chacun à la paire d'états $(\hbar\mathbf{k}, \nu = +; -\hbar\mathbf{k}, \nu = -)$; par convention, chaque paire est repérée par le vecteur d'onde \mathbf{k} de la particule de spin $+$. Le nombre de particules dans chacune de ces paires est décrit par l'opérateur :

$$\hat{n}_{(\text{paire } \mathbf{k})} = \hat{n}_{\mathbf{k},\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k},\downarrow} = a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{\mathbf{k},\uparrow} + a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow} \quad (\text{C-15})$$

de valeurs propres 0, 1 et 2. Or $|\overline{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ est donné par (C-1), somme de deux composantes, l'une à zéro particule et l'autre à deux particules. Donc :

$$\langle \overline{\varphi}_{\mathbf{k}} | \hat{n}_{(\text{paire } \mathbf{k})} | \overline{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle = 2 |v_{\mathbf{k}}|^2 = 2 \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \quad (\text{C-16})$$

et :

$$\langle \overline{\varphi}_{\mathbf{k}} | [\hat{n}_{(\text{paire } \mathbf{k})}]^2 | \overline{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle = 4 |v_{\mathbf{k}}|^2 = 4 \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \quad (\text{C-17})$$

L'écart quadratique moyen $\Delta n_{(\text{paire } \mathbf{k})}$ du nombre de particules dans une paire est donc :

$$\Delta n_{(\text{paire } \mathbf{k})} = \sqrt{4 |v_{\mathbf{k}}|^2 [1 - |v_{\mathbf{k}}|^2]} = 2 \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} \quad (\text{C-18})$$

Les fluctuations du nombre de particules dans chaque paire d'états peuvent donc être importantes.

En revanche, les fluctuations du nombre total de particules, obtenu par somme sur l'ensemble des paires, restent faibles. La valeur moyenne de ce nombre total est en effet :

$$\langle \hat{N} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 = 2 \sum_{\mathbf{k}} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \quad (\text{C-19})$$

Nous montrons ci-dessous que le carré de la fluctuation ΔN de $\langle N \rangle$ est donné par :

$$[\Delta N]^2 = 4 \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 [1 - |v_{\mathbf{k}}|^2] \quad (\text{C-20})$$

Comme $[1 - |v_{\mathbf{k}}|^2] \leq 1$, il vient :

$$[\Delta N]^2 \leq 4 \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 = 2 \langle \hat{N} \rangle \quad (\text{C-21})$$

de sorte que :

$$\frac{\Delta N}{\langle \hat{N} \rangle} \leq \sqrt{\frac{2}{\langle \hat{N} \rangle}} \quad (\text{C-22})$$

Ainsi, lorsque $\langle N \rangle$ est grand, les fluctuations relatives du nombre de particules sont elles très petites, décroissant au moins aussi vite que l'inverse de la racine carrée de la valeur moyenne.

Démonstration :

L'opérateur correspondant au carré du nombre de particules est :

$$[\hat{N}]^2 = \sum_{\mathbf{k}} [\hat{n}_{(\text{paire } \mathbf{k})}]^2 + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \hat{n}_{(\text{paire } \mathbf{k})} \hat{n}_{(\text{paire } \mathbf{k}')} \quad (\text{C-23})$$

Comme l'état $|\bar{\Psi}_{BCS}\rangle$ est un produit d'états de paires, ces dernières ne sont pas corrélées ; la valeur moyenne de cet opérateur s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \langle \bar{\Psi}_{BCS} | [\hat{N}]^2 | \bar{\Psi}_{BCS} \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | [\hat{n}_{(\text{paire } \mathbf{k})}]^2 | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | \hat{n}_{(\text{paire } \mathbf{k})} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}'} | \hat{n}_{(\text{paire } \mathbf{k}')} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}'} \rangle \end{aligned} \quad (\text{C-24})$$

L'expression (C-1) de $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ indique que :

$$\hat{n}_{(\text{paire } \mathbf{k})} |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = 2v_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}, \uparrow; -\mathbf{k}, \downarrow\rangle \quad (\text{C-25})$$

de sorte que :

$$\left\langle [\hat{N}]^2 \right\rangle = 4 \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 + 4 \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{k}'}|^2 \quad (\text{C-26})$$

Or le carré de la valeur moyenne $\langle N \rangle$ est égal au dernier terme de cette égalité, mais sans la contrainte $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ dans la sommation. L'écart quadratique moyen ΔN s'écrit donc :

$$[\Delta N]^2 = \left\langle [\hat{N}]^2 \right\rangle - [\langle N \rangle]^2 = 4 \sum_{\mathbf{k}} [|v_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^4] \quad (\text{C-27})$$

qui conduit immédiatement à (C-20).

C-2-b. Bosons dans le même état de spin

Pour des bosons, chaque paire contient deux états individuels de \mathbf{k} opposés. Pour chacun d'entre eux, nous montrons ci-dessous que :

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle = \text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} \quad (\text{C-28})$$

et que :

$$\left\langle [\hat{n}_{\mathbf{k}}]^2 \right\rangle = 2 \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle^2 + \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \quad (\text{C-29})$$

L'écart quadratique moyen de la distribution associée aux valeurs de $n_{\mathbf{k}}$ est donc :

$$\begin{aligned}\Delta n_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\langle [\hat{n}_{\mathbf{k}}]^2 \rangle - \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle^2} = \sqrt{\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle^2 + \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle} \\ &= \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}}\end{aligned}\quad (\text{C-30})$$

(la valeur moyenne du nombre de particules dans une paire d'états est $2\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle$, l'écart quadratique moyen de ce nombre $2\Delta n_{\mathbf{k}}$).

Démonstration :

Comme $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$ est symétrique par rapport aux deux états individuels \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$, on a :

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{n}_{-\mathbf{k}} \rangle \quad (\text{C-31})$$

avec :

$$\begin{aligned}\langle \varphi_{\mathbf{k}} | \hat{n}_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle &= \sum_{q=0}^{\infty} |x_{\mathbf{k}}|^{2q} \times q = |x_{\mathbf{k}}|^2 \frac{\partial}{\partial |x_{\mathbf{k}}|^2} \langle \varphi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{|x_{\mathbf{k}}|^2}{[1 - |x_{\mathbf{k}}|^2]^2}\end{aligned}\quad (\text{C-32})$$

de sorte que :

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{\langle \varphi_{\mathbf{k}} | \hat{n}_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle}{\langle \varphi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle} = \frac{|x_{\mathbf{k}}|^2}{1 - |x_{\mathbf{k}}|^2} \quad (\text{C-33})$$

qui conduit à (C-28).

Le calcul de la valeur moyenne du carré du nombre de particules s'effectue de façon semblable. Utilisant l'identité $q^2 = q(q-1) + q$ pour faire apparaître la dérivée seconde par rapport à $|x_{\mathbf{k}}|^2$, nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}\langle \varphi_{\mathbf{k}} | [\hat{n}_{\mathbf{k}}]^2 | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle &= \sum_{q=0}^{\infty} |x_{\mathbf{k}}|^{2q} \times q^2 \\ &= |x_{\mathbf{k}}|^4 \frac{\partial^2}{[\partial |x_{\mathbf{k}}|^2]^2} \langle \varphi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle + |x_{\mathbf{k}}|^2 \frac{\partial}{\partial |x_{\mathbf{k}}|^2} \langle \varphi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{2|x_{\mathbf{k}}|^4}{[1 - |x_{\mathbf{k}}|^2]^3} + \frac{|x_{\mathbf{k}}|^2}{[1 - |x_{\mathbf{k}}|^2]^2}\end{aligned}\quad (\text{C-34})$$

d'où il découle que :

$$\langle [\hat{n}_{\mathbf{k}}]^2 \rangle = \frac{\langle \varphi_{\mathbf{k}} | [\hat{n}_{\mathbf{k}}]^2 | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle}{\langle \varphi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle} = 2\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle^2 + \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \quad (\text{C-35})$$

Le nombre total de particules s'écrit :

$$\langle \hat{N} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 = \sum_{\mathbf{k}} \text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}} \quad (\text{C-36})$$

(chaque paire d'états apparaît deux fois dans cette somme ; on peut également la restreindre au demi-domaine D à condition d'ajouter un facteur 2). Comme l'état

apparié est un produit d'états de paires, ces dernières ne sont pas corrélées et :

$$\begin{aligned} \left\langle \left[\widehat{N} \right]^2 \right\rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \left\langle \left[\widehat{n}_{\mathbf{k}} \right]^2 \right\rangle + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \langle \widehat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \langle \widehat{n}_{\mathbf{k}'} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left[\left\langle \left[\widehat{n}_{\mathbf{k}} \right]^2 \right\rangle - \langle \widehat{n}_{\mathbf{k}} \rangle^2 \right] + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \widehat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \langle \widehat{n}_{\mathbf{k}'} \rangle \end{aligned} \quad (\text{C-37})$$

où, dans la seconde ligne, nous avons retranché $\langle \widehat{n}_{\mathbf{k}} \rangle^2$ dans la simple sommation, afin de pouvoir supprimer la contrainte $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ dans la double sommation qui suit. Le premier terme du second membre est la somme des carrés des écarts quadratiques moyens $\Delta n_{\mathbf{k}}$, obtenus en (C-30); le deuxième terme est égal au carré de la valeur moyenne $\langle \widehat{N} \rangle$ du nombre total de particules. Donc le carré $[\Delta N]^2$ de l'écart quadratique moyen du nombre total de particules ΔN s'écrit :

$$[\Delta N]^2 = \sum_{\mathbf{k}} [\Delta n_{\mathbf{k}}]^2 = \sum_{\mathbf{k}} \text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} \text{ch}^2 \theta_{\mathbf{k}} \quad (\text{C-38})$$

Comme dans le cas des fermions, ce carré ne contient plus qu'une seule somme sur \mathbf{k} , alors que le carré du nombre moyen de particules en contient deux. Or le nombre de termes non nuls dans ces sommes est le nombre de composantes de Fourier nécessaire à décrire la paire de particules qui a servi à construire l'état apparié au § B dans un cube de côté L (dimension de la boîte de quantification des impulsions, cf. § A-1). Ce nombre est de l'ordre du cube du rapport entre L et la dimension de la paire, donc très grand puisqu'il s'agit du rapport entre un volume macroscopique et un volume microscopique. Une double somme sur \mathbf{k} contient donc beaucoup plus de termes qu'une simple somme et, comme tous les termes sont positifs et comparables :

$$\left\langle \widehat{N} \right\rangle^2 \gg [\Delta N]^2 \quad (\text{C-39})$$

nous retrouvons donc, comme pour des fermions, que $\Delta N \ll \langle \widehat{N} \rangle$.

C-3. Valeurs moyennes "anormales"

Pour les calculs de valeur moyenne de l'énergie (en particulier au Complément B_{XVII}), nous aurons également besoin des valeurs moyennes de produits de deux opérateurs de création ou d'annihilation, par exemple pour des bosons :

$$\langle \overline{\varphi}_{\mathbf{k}} | a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} | \overline{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle \quad \text{et} \quad \langle \overline{\varphi}_{\mathbf{k}} | a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} | \overline{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle \quad (\text{C-40})$$

On remarque immédiatement qu'elles portent sur des opérateurs ne conservant pas le nombre de particules, et c'est la raison pour laquelle on les qualifie souvent de "valeurs moyennes anormales". Il peut paraître surprenant que de telles valeurs moyennes puissent jouer un rôle dans l'étude de processus physiques ne mettant pas en jeu la création ou la destruction de particules. Mais nous allons voir qu'elles apparaissent en fait de façon parfaitement naturelle dans le calcul de la valeur moyenne d'un hamiltonien qui conserve le nombre de particules. La raison en est simplement que $|\overline{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ n'est qu'une composante du vecteur d'état total (B-8), dans lequel il est associé à de nombreux autres $|\overline{\varphi}_{\mathbf{k}'}\rangle$; dans le vecteur d'état total, le nombre de particules

dans l'état $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ peut, par exemple, diminuer de 2 alors que celui des particules dans l'état $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}'}\rangle$ augmente simultanément de la même quantité. Au bout du compte, ce sont donc bien des composantes du vecteur d'état avec le même nombre total de particules que l'on manipule ; le caractère "anormal" n'est qu'apparent, dû au fait qu'on ne considère qu'une partie du vecteur d'état total.

C-3-a. Fermions dans un état singulet

Considérons l'effet de l'opérateur $a_{-\mathbf{k},\downarrow}a_{\mathbf{k},\uparrow}$ sur le ket $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ écrit en (C-1). Seule subsiste sa composante en $v(\mathbf{k})$, et deux anticommutations nous permettent d'écrire :

$$\begin{aligned} a_{-\mathbf{k},\downarrow}a_{\mathbf{k},\uparrow}|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle &= v_{\mathbf{k}}a_{-\mathbf{k},\downarrow}a_{\mathbf{k},\uparrow}a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger}a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger}|0\rangle = v_{\mathbf{k}}\left[a_{-\mathbf{k},\downarrow}a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger}\right]\left[a_{\mathbf{k},\uparrow}a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger}\right]|0\rangle \\ &= v_{\mathbf{k}}|0\rangle \end{aligned} \quad (\text{C-41})$$

Dans le produit scalaire de ce ket avec le bra $\langle\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}|$, seule sa composante $u^*(\mathbf{k})\langle 0|$ subsiste ; la valeur moyenne est donc donnée par :

$$\langle\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}|a_{-\mathbf{k},\downarrow}a_{\mathbf{k},\uparrow}|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = u_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}} = \sin\theta_{\mathbf{k}}\cos\theta_{\mathbf{k}}e^{2i\zeta_{\mathbf{k}}} \quad (\text{C-42})$$

L'anticommuation des deux opérateurs fournit alors :

$$\langle\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}|a_{\mathbf{k},\uparrow}a_{-\mathbf{k},\downarrow}|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = -u_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}} = -\sin\theta_{\mathbf{k}}\cos\theta_{\mathbf{k}}e^{2i\zeta_{\mathbf{k}}} \quad (\text{C-43})$$

Par conjugaison hermitique de (C-42), on obtient :

$$\langle\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}|a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger}a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger}|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^* = \sin\theta_{\mathbf{k}}\cos\theta_{\mathbf{k}}e^{-2i\zeta_{\mathbf{k}}} \quad (\text{C-44})$$

tandis que la valeur moyenne de $a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger}a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger}$ est l'opposée (anticommuation) :

$$\langle\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}|a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger}a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger}|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = -\sin\theta_{\mathbf{k}}\cos\theta_{\mathbf{k}}e^{-2i\zeta_{\mathbf{k}}} \quad (\text{C-45})$$

Nous avons vu au § C-1-a que les fonctions $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$ sont paires ; on peut donc changer le signe de \mathbf{k} dans le membre de gauche des relations précédentes sans modification du membre de droite.

C-3-b. Bosons dans le même état de spin

Pour les bosons, il est plus commode de calculer en premier la valeur moyenne d'un produit d'opérateurs de création :

$$\langle\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}|a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\text{ch}^2\theta_{\mathbf{k}}}\langle\varphi_{\mathbf{k}}|a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{C-46})$$

Cette expression contient le produit du ket :

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle &= a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}\sum_{q=0}^{\infty}[-x_{\mathbf{k}}]^q|n_{\mathbf{k}}=q;n_{-\mathbf{k}}=q\rangle \\ &= \sum_{q=0}^{\infty}(q+1)[-x_{\mathbf{k}}]^q|n_{\mathbf{k}}=q+1;n_{-\mathbf{k}}=q+1\rangle \end{aligned} \quad (\text{C-47})$$

par le bra :

$$\sum_{q'=0}^{\infty} [-x_{\mathbf{k}}^*]^{q'} \langle n_{\mathbf{k}} = q'; n_{-\mathbf{k}} = q' \rangle \quad (\text{C-48})$$

Il faut donc pour obtenir un terme non nul que $q' = q + 1$, ce qui conduit à :

$$(q + 1) [-x_{\mathbf{k}}]^{q+1} [-x_{\mathbf{k}}^*]^{q+1} \quad (\text{C-49})$$

dont la somme sur q donne, compte tenu de (C-32) :

$$\sum_{q=0}^{\infty} (q + 1) [-x_{\mathbf{k}}^*] |x_{\mathbf{k}}|^{2q} = [-x_{\mathbf{k}}^*] [\langle n_{\mathbf{k}} \rangle + 1] \langle \varphi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle \quad (\text{C-50})$$

Reste enfin à diviser par $\langle \varphi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle$ comme dans (C-46) pour obtenir, en insérant la valeur (C-11) de $x_{\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle &= -\text{th}\theta_{\mathbf{k}} e^{-2i\zeta_{\mathbf{k}}} [1 + \text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}}] \\ &= -e^{-2i\zeta_{\mathbf{k}}} \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (\text{C-51})$$

Quant à l'autre valeur moyenne "anormale" $\langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle$, une simple opération de conjugaison hermitique montre qu'elle est la complexe conjuguée de la précédente :

$$\langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle = -e^{2i\zeta_{\mathbf{k}}} \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} \quad (\text{C-52})$$

Comme pour les fermions, les fonctions $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$ sont paires, ce qui permet de changer le signe de \mathbf{k} dans le membre de gauche des relations précédentes sans changer le résultat.

D. Corrélations entre particules, fonction d'onde de paires

Comme nous l'avons mentionné dans l'introduction de ce chapitre, le grand intérêt des états appariés est de permettre de faire varier les fonctions de corrélation spatiales d'un système de particules identiques. En plus des corrélations purement statistiques, imposées par l'indiscernabilité des particules et déjà présentes dans un gaz parfait, on peut alors inclure des corrélations dynamiques dues aux interactions. Ceci permet, par exemple, de mieux optimiser l'énergie que ne le ferait un simple état de Fock. Nous nous limiterons ici à l'étude de la fonction de corrélation diagonale à deux particules, puisque c'est elle qui fixe la valeur moyenne de l'hamiltonien d'interaction. Nous verrons comment ceci permet déjà de faire apparaître une nouvelle fonction d'onde, que nous appellerons "fonction d'ondes de paires". Dans les compléments de ce chapitre nous étudierons également les fonctions de corrélation non diagonales, celle à une particule dont le comportement à grande distance peut signaler l'existence d'une condensation de Bose-Einstein, ainsi que celle à deux particules.

De façon générale, on pourrait se demander quel est le sens physique de fonctions de corrélations calculées dans des états $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ ou $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle$, puisque ce sont des superpositions cohérentes de kets contenant des nombres de particules N différents.

Cependant, les opérateurs dont les fonctions de corrélation sont des valeurs moyennes conservent le nombre de particules, de sorte qu'ils sont insensibles aux cohérences entre kets de valeurs de N différentes. De plus, nous avons vu au § C-2 que, lorsque la valeur moyenne $\langle \widehat{N} \rangle$ du nombre de particules est grande, les fluctuations relatives de ce nombre sont négligeables. Dans cette limite des grands $\langle \widehat{N} \rangle$, on peut donc s'attendre à ce que les résultats obtenus avec $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ ou $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle$ soient très proches de ceux qu'auraient donnés les $|\Psi_P\rangle$, ou ces fluctuations sont strictement nulles. Nous reviendrons sur cette question plus en détail au § 1 du Complément B_{XVII}.

L'étude des fonctions de corrélation dans le cas où les particules sont appariées dans le même état de spin évite de manipuler des indices autres que ceux des variables orbitales. Nous commençons donc par ce cas plus simple, et traiterons ensuite celui des particules appariées dans un état singulet.

D-1. Particules dans le même état de spin

La relation (B-34) du Chapitre XVI indique que la fonction de corrélation diagonale à deux particules $G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ s'écrit :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1) \rangle \quad (\text{D-1})$$

Si nous remplaçons les opérateurs champ et leurs adjoints par les expressions (A-3) et (A-6) du Chapitre XVI, prises dans la base des ondes planes normées, il vient :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} e^{i[(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}_1 + (\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}_2]} \langle a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \rangle \quad (\text{D-2})$$

où la valeur moyenne du produit des 4 opérateurs de création et d'annihilation est à prendre dans un état apparié. La Figure 1 symbolise les différents termes qui sont présents dans cette fonction de corrélation.

D-1-a. Simplifications dues à l'appariement

Une grande simplification du calcul vient de ce que, dans un état apparié, les populations des deux états individuels de nombres d'onde opposés \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$ sont toujours égales. En conséquence, seules les combinaisons des 4 opérateurs qui ne changent pas cette égalité conduisent à des valeurs moyennes non nulles. Trois possibilités se présentent alors :

– **Cas I** : les deux opérateurs d'annihilation concernent deux états individuels n'appartenant pas à une même paire ($\mathbf{k}_3 \neq \pm \mathbf{k}_4$) ; les deux opérateurs de création doivent alors restaurer à leur valeur initiale les populations de ces deux mêmes états, sinon leur valeur moyenne serait nulle ; ces termes sont parfois appelés de "diffusion vers l'avant". On a alors, soit $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1$ et $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_2$ (terme direct), soit $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_2$ et $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_1$ (terme d'échange).

– **Cas II** : les deux opérateurs d'annihilation concernent les deux états d'une première paire ($\mathbf{k}_4 = -\mathbf{k}_3$), et ceux de création concernent les deux états d'une autre paire ($\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1$). Nous parlerons alors de "processus d'annihilation-création de paires" .

– **Cas III** : les deux opérateurs d'annihilation concernent les deux états d'une même paire, et ceux de création reconstruisent les deux mêmes états (c'est un cas particulier

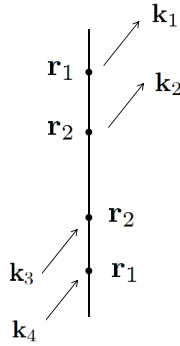


FIGURE 1 – Ce diagramme symbolise les termes qui interviennent dans le calcul de la fonction de corrélation de deux particules aux points \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_1 . Les deux flèches entrantes en bas à gauche représentent les particules qui disparaissent sous l'effet des opérateurs d'annihilation; elles sont associées à une exponentielle imaginaire de la position avec un coefficient positif. Les deux flèches sortantes en haut à droite représentent les particules qui apparaissent sous l'effet des opérateurs de création, et sont associées à une exponentielle imaginaire de coefficient négatif. La fonction de corrélation est la somme de ces termes pour toutes les valeurs des 4 vecteurs \mathbf{k} .

du cas précédent); une autre possibilité est que les deux opérateurs d'annihilation concernent le même état individuel (tous les vecteurs d'onde \mathbf{k} doivent alors être égaux).

Lorsque l'on reporte ces conditions sur les valeurs des vecteurs d'onde dans (D-2), on remarque immédiatement que les termes correspondant au cas I et II comprennent deux sommations sur des vecteurs d'onde, alors que les termes correspondant au cas III n'en contiennent plus qu'une. Ces derniers sont donc beaucoup moins nombreux si le volume L^3 est grand (macroscopique), car les sommes sur les vecteurs d'onde comprennent alors un très grand nombre de termes; ils apportent en général une contribution négligeable devant les termes de catégories I et II, qui sont donc les seules que nous prendrons en compte. Pour la même raison, dans l'évaluation de ces termes, nous ne tiendrons pas compte des contraintes $\mathbf{k}_3 \neq \pm\mathbf{k}_4$ ou $\mathbf{k}_3 \neq \pm\mathbf{k}_1$, car les ignorer ne fait qu'introduire des termes supplémentaires négligables.

D-1-b. Expression de la fonction de corrélation

Le terme direct est obtenu pour $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1$ et $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_2$; sa dépendance spatiale disparaît donc complètement. Puisque \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 sont différents, la valeur moyenne du produit d'opérateurs s'écrit également $\langle a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2} \rangle$ – pour des fermions, deux signes moins introduits par des anticommutations se compensent. Or nous avons vu en (B-8) que l'état apparié est un produit tensoriel d'états de paires, de sorte que la valeur moyenne recherchée n'est autre que le produit de celle des deux premiers opérateurs par celle des deux derniers, c'est-à-dire le produit de deux valeurs moyennes

de nombres d'occupation. Nous obtenons ainsi une première contribution :

$$G_2^{\text{dir}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_1} \rangle \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_2} \rangle = \frac{\langle \hat{N} \rangle^2}{L^6} \quad (\text{D-3})$$

où les sommes sur \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 sont considérées comme indépendantes puisque, comme indiqué plus haut, nous pouvons négliger l'effet de la contrainte qui lie ces deux indices.

Le terme d'échange est obtenu pour $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_2$ et $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_1$; il conserve pour sa part une dépendance spatiale. Comme pour le terme direct, on regroupe les opérateurs de création et d'annihilation relatifs aux mêmes états individuels, mais cette fois il suffit pour cela d'une seule commutation entre opérateurs ; il s'introduit ainsi un facteur η , égal à -1 pour des fermions. Il vient alors :

$$G_2^{\text{ex}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\eta}{L^6} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_1} \rangle \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_2} \rangle \quad (\text{D-4})$$

Le terme d'annihilation-création de paires $\mathbf{k}_4 = -\mathbf{k}_3$ et $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1$ conserve lui aussi une dépendance spatiale, mais ne permet plus de faire apparaître de valeurs moyennes de nombres d'occupation. Il s'écrit en effet :

$$G_2^{\text{paire-paire}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_4} e^{i(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \langle a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{-\mathbf{k}_1}^\dagger \rangle \langle a_{-\mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_4} \rangle \quad (\text{D-5})$$

et sa structure est schématisée sur la Figure 2. L'expression (D-5) contient les valeurs moyennes de produits d'opérateurs qui ne conservent pas le nombre de particules, mais en détruisent (ou en créent) deux ; ce sont donc des "valeurs moyennes anormales", comme nous les avons désignées au § C-3. Nous confirmons donc ici que ces valeurs moyennes anormales apparaissent de façon parfaitement naturelle dans le calcul de la valeur moyenne d'un opérateur qui conserve le nombre de particules ; les raisons en ont été discutées au § C-3. Si l'on définit la "fonction d'ondes de paires" ϕ_{paire} par :

$$\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \rangle \quad (\text{D-6})$$

on peut écrire cette fonction de corrélation sous la forme :

$$G_2^{\text{paire-paire}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = |\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|^2 \quad (\text{D-7})$$

La fonction de corrélation totale $G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ est la somme des trois contributions précédentes :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = G_2^{\text{dir}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + G_2^{\text{ex}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + G_2^{\text{paire-paire}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (\text{D-8})$$

Pour des bosons dans le même état de spin, si l'on reporte dans cette fonction de corrélation les valeurs moyennes obtenues en (C-28), (C-51) et (C-52), on constate que la fonction de corrélation binaire dépend explicitement des paramètres $\theta_{\mathbf{k}}$, ainsi que des phases $\zeta_{\mathbf{k}}$, qui servent à définir l'état apparié. Nous vérifions donc bien que

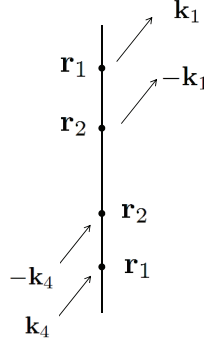


FIGURE 2 – Diagramme symbolisant le terme paire-paire intervenant dans la fonction de corrélation binaire. La représentation est la même que celle de la Figure 1.

ces paramètres permettent de modifier la fonction de corrélation. Par exemple, on trouve que :

$$\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-2\zeta_{\mathbf{k}})} \quad (\text{D-9})$$

La fonction d'onde de paires dépend donc directement des phases $\zeta_{\mathbf{k}}$; en fait, nous verrons dans les compléments qu'elles jouent un rôle particulièrement important dans l'optimisation de l'énergie. Pour des bosons, cette fonction d'onde est toujours paire, puisque nous avons vu au § C-1-b que c'est le cas des fonctions $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$ introduites en (C-11).

Remarque :

Pour des bosons en interaction présentant la condensation de Bose-Einstein, nous adjoindrons au Complément B_{XVII} (§ 4) et au Complément E_{XVII} un état fortement peuplé d'impulsion nulle ($\mathbf{k} = 0$) à l'état apparié $|\Psi_{\text{app}}\rangle$. Ceci introduira dans les fonctions de corrélation des termes supplémentaires par rapport à ceux qui sont calculés dans ce chapitre ; si la population de l'état individuel d'impulsion nulle est très élevée, ces termes supplémentaires peuvent être dominants.

D-2. Fermions dans un état singulet

Pour les fermions de spin 1/2, comme chaque spin peut prendre deux directions, il existe un plus grand nombre de fonctions de corrélation. Plusieurs d'entre elles seront étudiées au § 2 du Complément C_{XVII}. Ici, nous nous contenterons de calculer l'une d'entre elles, relative à des spins opposés (c'est en effet elle qui jouera le rôle le plus important) :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \uparrow; \mathbf{r}_2, \downarrow) = \left\langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}_1) \right\rangle \quad (\text{D-10})$$

La relation (D-2) devient maintenant :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \uparrow; \mathbf{r}_2, \downarrow) = \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} e^{i[(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}_1 + (\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}_2]} \left\langle a_{\mathbf{k}_1, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_2, \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_3, \downarrow} a_{\mathbf{k}_4, \uparrow} \right\rangle \quad (\text{D-11})$$

Le diagramme schématisant chaque terme de cette somme est obtenu en ajoutant des indices de spin aux positions sur la Figure 1 – cf. Figure 3 du Complément C_{XVII}.

Le calcul se mène ensuite de façon semblable à celui du § D-1. Le terme direct s'écrit :

$$G_2^{\text{dir}}(\mathbf{r}_1, \uparrow; \mathbf{r}_2, \downarrow) = \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_1, \uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_2, \downarrow} \rangle = \frac{\langle \widehat{N}_\uparrow \rangle \langle \widehat{N}_\downarrow \rangle}{L^6} \quad (\text{D-12})$$

Il n'existe pas de terme d'échange où $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_2$ et $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_1$, car il introduirait la valeur moyenne d'un opérateur qui change la direction d'un spin dans deux paires différentes, détruisant ainsi l'égalité des populations de spins opposés au sein de chaque paire (sauf dans le cas particulier $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$, qui apporte une contribution négligeable). Reste le terme de destruction-crédation de paires $\mathbf{k}_4 = -\mathbf{k}_3$ et $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1$, dont l'expression est :

$$G_2^{\text{paire-paire}}(\mathbf{r}_1, \uparrow; \mathbf{r}_2, \downarrow) = \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_4} e^{i(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \left\langle a_{\mathbf{k}_1, \uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}_1, \downarrow}^\dagger \right\rangle \left\langle a_{-\mathbf{k}_4, \downarrow} a_{\mathbf{k}_4, \uparrow} \right\rangle \quad (\text{D-13})$$

Ici aussi, le terme paire-paire fait apparaître des valeurs moyennes anormales. On peut également introduire une fonction d'onde de paires ϕ_{paire} par :

$$\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle a_{\mathbf{k}, \downarrow} a_{-\mathbf{k}, \uparrow} \rangle = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle a_{-\mathbf{k}, \downarrow} a_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle \quad (\text{D-14})$$

dont le module au carré apparaît dans la fonction de corrélation :

$$G_2^{\text{paire-paire}}(\mathbf{r}_1, \uparrow; \mathbf{r}_2, \downarrow) = |\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|^2 \quad (\text{D-15})$$

Le report des relations (C-42) dans (D-14) conduit à :

$$\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + 2\zeta_{\mathbf{k}})} \quad (\text{D-16})$$

Le rôle important de cette fonction d'onde de paires dans le phénomène de condensation BCS sera discuté en détail au Complément C_{XVII}. Nous verrons en particulier que cette fonction n'intervient pas seulement dans la fonction de corrélation binaire diagonale : elle détermine également les propriétés non diagonales de l'opérateur densité à grande distance, ce qui revient à dire qu'elle joue le rôle de paramètre d'ordre. Nous avons vu que les paramètres $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$ sont des fonctions paires de \mathbf{k} ; la fonction $\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r})$ est donc également une fonction paire de \mathbf{r} .

La fonction de corrélation totale est alors :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \uparrow; \mathbf{r}_2, \downarrow) = \frac{\langle \widehat{N}_\uparrow \rangle \langle \widehat{N}_\downarrow \rangle}{L^6} + |\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|^2 \quad (\text{D-17})$$

Si l'on reporte dans ce résultat l'expression (D-16) de $\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r})$, on obtient la dépendance de la fonction de corrélation par rapport aux paramètres $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$ qui servent à définir l'état apparié, et l'on vérifie ainsi qu'ils permettent de faire varier cette fonction.

Remarque :

Dans le cas particulier où tous les $\theta_{\mathbf{k}}$ sont nuls ou égaux à $\pi/2$, nous avons noté (*cf.* à la fin du § C-1-a) que l'état apparié se réduit à un état de Fock pour lequel les phases $\zeta_{\mathbf{k}}$ ne jouent plus aucun rôle. On vérifie alors aisément que les valeurs moyennes anormales sont toutes nulles, ainsi bien sûr que la fonction $\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r})$. Mais, pour d'autres choix des paramètres $\theta_{\mathbf{k}}$, les phases jouent au contraire un rôle particulièrement important comme nous le verrons par exemple au Complément C_{XVII}.

E. Les états appariés comme vide de quasi-particules ; transformations de Bogolubov-Valatin

L'hamiltonien d'un système de particules libres s'écrit :

$$\widehat{H}_0 = \sum_i (\hbar\omega_i) a_i^\dagger a_i \quad (\text{E-1})$$

où $\hbar\omega_i$ désigne l'énergie d'un état individuel repéré par l'indice i . L'état fondamental $|\Phi_0\rangle$ de \widehat{H}_0 est vecteur propre de tous les opérateurs d'annihilation a_i avec la valeur propre nulle :

$$a_i |\Phi_0\rangle = 0 \quad (\text{E-2})$$

Le ket apparié $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ n'est pas vecteur propre des opérateurs d'annihilation habituels a_i . Nous allons cependant introduire au § E-1 une transformation linéaire des a_i et a_i^\dagger en de nouveaux opérateurs d'annihilation et de création, et montrer au § E-2 que $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ est vecteur propre avec la valeur propre nulle de tous les nouveaux opérateurs d'annihilation. L'état apparié apparaît alors comme un "vide de particules". De plus, au § E-3, nous associerons à $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ une famille d'opérateurs ayant la même forme que l'hamiltonien (E-1), mais où les a_i et a_i^\dagger sont remplacés par les nouveaux opérateurs d'annihilation et de création. L'intérêt de cette association est qu'il est possible, dans certains cas (illustrés dans les compléments), d'identifier un opérateur de cette famille avec l'hamiltonien d'un problème physique donné (au besoin, moyennant certaines approximations). Le problème de la recherche de l'état fondamental et des états excités est alors résolu, comme pour un système de particules indépendantes. On peut ainsi considérer $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ comme l'état fondamental d'un hamiltonien de "quasi-particules" indépendantes, tandis que les nouveaux opérateurs de création permettent de construire toute une base orthogonale d'états excités.

E-1. Transformation des opérateurs de création et annihilation

Pour des bosons dans le même état de spin, l'état $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$ appartient à l'espace $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}$ associé à la paire $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$; cet espace est engendré par l'effet des deux opérateurs de création $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ et $a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}$ sur le vide. Pour des fermions dans des états de spin opposés, c'est également le cas si nous simplifions la notation \mathbf{k}, \uparrow en \mathbf{k} ainsi que $-\mathbf{k}, \downarrow$ en $-\mathbf{k}$ (nous repérons chaque paire d'états individuels par la valeur de \mathbf{k} associée au spin \uparrow). Dans les deux cas, nous allons définir deux nouveaux couples d'opérateurs de création et d'annihilation qui agissent dans $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}$.

Nous introduisons donc les deux opérateurs d'annihilation $b_{\mathbf{k}}$ et $b_{-\mathbf{k}}$ définis lorsque $\mathbf{k} \neq 0$ par :

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + \eta v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \\ b_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} \end{aligned} \quad (\text{E-3})$$

ainsi que les opérateurs hermitiques conjugués $b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ et $b_{-\mathbf{k}}^{\dagger}$:

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} &= u_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \eta v_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}} \\ b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} &= u_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (\text{E-4})$$

Pour le moment, $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$ sont deux nombres complexes quelconques.

Comme dans les Chapitres XV et XVI, nous notons $[A, B]_{-\eta}$ le commutateur de A et B si $\eta = 1$ (bosons), l'anticommutateur si $\eta = -1$ (fermions). Calculons alors $[b_{\mathbf{k}}, b_{-\mathbf{k}}]_{-\eta}$; comme $a_{\mathbf{k}}$ (anti)commute avec $a_{-\mathbf{k}}$ et comme $a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}$ (anti)commute avec $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$, ne subsistent que les termes croisés en $u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}$:

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{-\mathbf{k}}]_{-\eta} = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left\{ [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}^{\dagger}]_{-\eta} + \eta [a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}, a_{-\mathbf{k}}]_{-\eta} \right\} \quad (\text{E-5})$$

Pour des bosons, le commutateur de $a_{-\mathbf{k}}$ avec $a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}$ vaut 1, donc celui de $a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}$ avec $a_{-\mathbf{k}}$ vaut -1 ; pour des fermions, les deux anticommutateurs de ces opérateurs sont égaux à 1, de sorte que nous obtenons dans les deux cas :

$$\begin{aligned} [b_{\mathbf{k}}, b_{-\mathbf{k}}]_{-\eta} &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \{1 - 1\} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{E-6})$$

Par conjugaison hermitique :

$$[b_{\mathbf{k}}^{\dagger}, b_{-\mathbf{k}}^{\dagger}]_{-\eta} = 0 \quad (\text{E-7})$$

Calculons maintenant $[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^{\dagger}]_{-\eta}$. Cette fois, ce sont les deux termes carrés en $|u_{\mathbf{k}}|^2$ et $|v_{\mathbf{k}}|^2$ qui interviennent. Celui en $|u_{\mathbf{k}}|^2$ contient un (anti) commutateur $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}^{\dagger}]$ qui vaut 1; celui en $|v_{\mathbf{k}}|^2$ contient pour des bosons un commutateur de $a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}$ avec $a_{-\mathbf{k}}$ qui vaut -1 , ou pour des fermions un anticommutateur de ces deux opérateurs qui vaut $+1$. Le résultat est donc :

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^{\dagger}]_{-\eta} = |u_{\mathbf{k}}|^2 - \eta |v_{\mathbf{k}}|^2 \quad (\text{E-8})$$

De même :

$$\left[b_{-\mathbf{k}}, b_{-\mathbf{k}}^\dagger \right]_{-\eta} = |u_{\mathbf{k}}|^2 - \eta |v_{\mathbf{k}}|^2 \quad (\text{E-9})$$

Enfin, restent à calculer $\left[b_{\mathbf{k}}, b_{-\mathbf{k}}^\dagger \right]_{-\eta}$ et $\left[b_{-\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^\dagger \right]_{-\eta}$. Le premier est nul puisque $a_{\mathbf{k}}$ (anti)commute à la fois avec $a_{-\mathbf{k}}^\dagger$ et lui-même⁸, et que $a_{-\mathbf{k}}^\dagger$ (anti)commute avec lui-même et avec $a_{-\mathbf{k}}$; le raisonnement est semblable pour le second, de sorte que :

$$\begin{aligned} \left[b_{\mathbf{k}}, b_{-\mathbf{k}}^\dagger \right]_{-\eta} &= 0 \\ \left[b_{-\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^\dagger \right]_{-\eta} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{E-10})$$

En résumé, il suffit d'imposer pour toute valeur de \mathbf{k} la condition :

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 - \eta |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \quad (\text{E-11})$$

pour que :

$$\begin{aligned} \left[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^\dagger \right]_{-\eta} &= 1 \\ \left[b_{-\mathbf{k}}, b_{-\mathbf{k}}^\dagger \right]_{-\eta} &= 1 \end{aligned} \quad (\text{E-12})$$

de sorte que les opérateurs $b_{\mathbf{k}}$ et $b_{-\mathbf{k}}$ ainsi que leurs adjoints obéissent aux mêmes relations d'(anti)commutation que des opérateurs habituels d'annihilation et de création de particules identiques.

Pour des fermions, on retrouve une condition analogue à la condition (C-3), ce qui permet de simplement poser comme en (C-4) :

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \cos \theta_{\mathbf{k}} e^{-i\zeta_{\mathbf{k}}} \\ v_{\mathbf{k}} &= \sin \theta_{\mathbf{k}} e^{i\zeta_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (\text{E-13})$$

Cette transformation unitaire des opérateurs de création et d'annihilation est appelée "transformation de Bogolubov-Valatin".

Pour des bosons, on choisira :

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \text{ch} \theta_{\mathbf{k}} e^{-i\zeta_{\mathbf{k}}} \\ v_{\mathbf{k}} &= \text{sh} \theta_{\mathbf{k}} e^{i\zeta_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (\text{E-14})$$

La comparaison avec la relation (C-11) montre alors que :

$$x_{\mathbf{k}} = \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \quad (\text{E-15})$$

La transformation unitaire des opérateurs de création et d'annihilation pour des bosons est appelée "transformation de Bogolubov".

8. Pour des fermions, son carré est identiquement nul.

E-2. Effet sur les kets $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$

Nous allons voir que les vecteurs $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ sont kets propres de deux opérateurs d'annihilation $b_{\mathbf{k}}$ et $b_{-\mathbf{k}}$ avec les valeurs propres zéro ; cette propriété les rend similaires à un état habituel du vide qui s'annule sous l'action de tous les opérateurs d'annihilation $a_{\mathbf{k}}$.

E-2-a. Fermions dans un état singulet

Calculons l'effet de ces opérateurs sur le ket $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ défini par la relation (C-1), que nous écrivons avec les notations simplifiées déjà utilisées plus haut (\mathbf{k} est associé à un indice de spin + et $-\mathbf{k}$ à un indice de spin -) :

$$|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = \left[u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right] |0\rangle \tag{E-16}$$

Commençons par l'opérateur $b_{\mathbf{k}}$ défini en (E-3). Son terme en $u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}$ donne zéro lorsqu'il agit sur le terme en $u_{\mathbf{k}}$ de $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$; ne subsiste que le terme en $v_{\mathbf{k}}$, où l'opérateur redescend de un à zéro le nombre d'occupation de l'état \mathbf{k}, \uparrow , puisque :

$$a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} |0\rangle = a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} |0\rangle \tag{E-17}$$

Pour l'opérateur $v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}$, il donne zéro lorsqu'il agit sur le terme en $v_{\mathbf{k}}$ de $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ (pour des fermions le carré d'un opérateur de création est nul) ; seul reste le terme en $u_{\mathbf{k}}$. Nous obtenons donc :

$$b_{\mathbf{k}} |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = \left[u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right] |0\rangle = 0 \tag{E-18}$$

Le calcul est le même pour l'opérateur $b_{-\mathbf{k}}$, à ceci près que l'opérateur $a_{-\mathbf{k}}$ doit subir une anticommutation avec $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ avant d'être regroupé avec $a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}$ pour redescendre de un à zéro le nombre d'occupation de l'état $-\mathbf{k}$. L'anticommutation introduit donc un changement de signe, mais comme la définition de $b_{-\mathbf{k}}$ ne contient pas de signe -, on trouve à nouveau :

$$b_{-\mathbf{k}} |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} [-a_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}] |0\rangle = 0 \tag{E-19}$$

Ainsi les deux opérateurs $b_{\mathbf{k}}$ et $b_{-\mathbf{k}}$ admettent le ket $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ comme vecteur propre de valeur propre nulle.

E-2-b. Bosons dans le même état de spin

Compte tenu de (E-15), la relation (C-7) devient :

$$|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_{q=0}^{\infty} \frac{1}{q!} \left[-\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right]^q \left[a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right]^q |0\rangle \tag{E-20}$$

Comme :

$$a_{\mathbf{k}} \left[a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right]^q |0\rangle = \left(a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \left[a_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right]^{q-1} \left[a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right]^q |0\rangle = (q) \left[a_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right]^{q-1} \left[a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right]^q |0\rangle \tag{E-21}$$

on a :

$$u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = u_{\mathbf{k}} \sum_{q=0}^{\infty} \frac{q}{q!} \left[-\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right]^q \left[a_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right]^{q-1} \left[a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right]^q |0\rangle \tag{E-22}$$

soit, puisque $a_{-\mathbf{k}}^\dagger$ commute avec tous les opérateurs de cette expression (nous posons $q' = q - 1$) :

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle &= -v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger \sum_{q'=0}^{\infty} \frac{1}{q'!} \left[-\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right]^{q'} \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger \right]^{q'} \left[a_{-\mathbf{k}}^\dagger \right]^{q'} |0\rangle \\ &= -v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle \end{aligned} \quad (\text{E-23})$$

Donc :

$$\left(u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = 0 \quad (\text{E-24})$$

qui indique bien que $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$ est vecteur propre de l'opérateur $b_{\mathbf{k}}$ défini en (E-3) :

$$b_{\mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = 0 \quad (\text{E-25})$$

Le même calcul conduit à :

$$u_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = -v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{E-26})$$

et donc à :

$$b_{-\mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = 0 \quad (\text{E-27})$$

Comme pour les fermions, les deux opérateurs $b_{\mathbf{k}}$ et $b_{-\mathbf{k}}$ admettent le ket $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ comme vecteur propre de valeur propre nulle.

E-3. Base d'états excités, quasi-particules

Pour des bosons comme des fermions, nous avons vu que les nouveaux opérateurs de création et d'annihilation introduits dans (E-3) et (E-4) présentent les mêmes propriétés que celles d'opérateurs de création et d'annihilation habituels. En particulier, les deux opérateurs :

$$\hat{n}(b_{\mathbf{k}}) = b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \quad \hat{n}(b_{-\mathbf{k}}) = b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} \quad (\text{E-28})$$

ont comme valeurs propres tous les entiers positifs ou nuls, en parfaite analogie avec des opérateurs correspondant à la population d'états individuels. Par analogie avec (E-1), il est donc naturel d'introduire l'opérateur :

$$\hat{H}_B = \sum_{\mathbf{k} \in D} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \left[b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} \right] \quad (\text{E-29})$$

où, pour le moment, les $\omega_{\mathbf{k}}$ sont des paramètres libres, au même titre que ceux qui définissent l'état apparié (ils seront fixés ultérieurement, en fonction du problème physique étudié). Dans (E-29) la somme est limitée comme plus haut à un demi-espace des impulsions, ce qui permet d'éviter une double prise en compte des impulsions opposées. Les valeurs propres de \hat{H}_B sont toutes de la forme :

$$E_B = \sum_{\mathbf{k} \in D} \left[n(b_{\mathbf{k}}) + n(b_{-\mathbf{k}}) \right] \hbar \omega_{\mathbf{k}} \quad (\text{E-30})$$

où $n(b_{\mathbf{k}})$ et $n(b_{-\mathbf{k}})$ sont des entiers positifs ou nuls (quelconques pour des bosons, restreints à 0 et 1 pour des fermions).

L'état fondamental $|\Phi_0(b)\rangle$ de \hat{H}_B est vecteur propre de tous les opérateurs d'annihilation $b_{\mathbf{k}}$ et $b_{-\mathbf{k}}$ de valeurs propres nulles. Or nous avons vu en (B-8) pour des bosons, et en (B-11) pour des fermions, que le vecteur d'état apparié est un produit tensoriel d'états $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$, qui sont précisément vecteurs propres de valeurs propres nulles de ces deux opérateurs. L'état apparié, $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ pour des bosons⁹, ou $|\Psi_{BCS}\rangle$ pour des fermions, est donc vecteur propre de \hat{H}_B de valeur propre nulle (état fondamental).

Ensuite, par action des opérateurs de création $b_{\mathbf{k}}^\dagger$ et $b_{-\mathbf{k}}^\dagger$ sur $|\Phi_0(b)\rangle$, on peut obtenir les autres états propres de \hat{H}_B (états excités). Pour des bosons, on pourra faire agir chacun de ces deux opérateurs un nombre arbitraire de fois. Pour des fermions, on n'obtiendra que 3 états excités en faisant agir, soit $b_{\mathbf{k}}^\dagger$, soit $b_{-\mathbf{k}}^\dagger$, soit encore leur produit ; l'anticommutation des opérateurs fait que toute puissance supplémentaire des opérateurs donne zéro. Pour finir, l'opérateur (E-29) partage beaucoup de propriétés avec l'hamiltonien d'un ensemble de particules sans interactions mutuelles. De même que les opérateurs de création habituels permettent d'ajouter des particules dans un système de particules libres identiques, de même les opérateurs de création $b_{\mathbf{k}}^\dagger$ et $b_{-\mathbf{k}}^\dagger$ peuvent être considérés comme ceux qui ajoutent une "quasi-particule" supplémentaire dans le système physique. Ces quasi-particules ne coïncident pas avec les particules d'un système réellement sans interactions, comme l'illustre l'expression de ces opérateurs de création. Elles fournissent toutefois une base d'états qui permet de raisonner comme en l'absence d'interactions, ce qui introduit un cadre de raisonnement très puissant dans de nombreux domaines de physique.

Bien sûr, pour que les considérations précédentes aient un intérêt physique, il faut montrer que l'hamiltonien du problème étudié peut effectivement être approché par un opérateur \hat{H}_B , moyennant un choix adéquat de tous les paramètres $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ et $\omega_{\mathbf{k}}$. A priori, cela n'a rien d'évident : l'hamiltonien d'un ensemble de particules comprend en général des termes d'interaction à deux corps, et ces derniers s'expriment comme des sommes de produits de deux opérateurs de création $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ et de deux opérateurs d'annihilation $a_{\mathbf{k}}$, donc 4 opérateurs en tout. Or, si l'on reporte les définitions (E-3) et (E-4) dans (E-29) pour exprimer \hat{H}_B en fonction des anciens opérateurs de création et d'annihilation $a_{\mathbf{k}}$ et $a_{\mathbf{k}}^\dagger$, il est clair qu'on n'obtiendra que des combinaisons de produits de 2 opérateurs. Certaines approximations seront donc nécessaires pour que \hat{H}_B puisse être considéré comme un hamiltonien approché physiquement pertinent. Nous verrons dans les compléments des exemples de situations où c'est effectivement le cas.

Conclusion

En conclusion de ce chapitre, les états appariés offrent un puissant outil d'étude qui s'applique à la fois aux fermions et aux bosons. Leur utilisation fournit une méthode systématique permettant d'apporter une certaine souplesse aux calculs variationnels en présence d'interactions. De plus, partant d'un état fondamental apparié ainsi obtenu, on peut construire toute une base d'états excités, grâce à l'utilisation

9. Pour des bosons, nous associerons au Complément B_{XVII} un état cohérent $|\varphi_0\rangle$ pour obtenir l'état $|\Phi_B\rangle$. Mais, comme aucun des opérateurs $b_{\mathbf{k}}$ ou $b_{-\mathbf{k}}$ n'agit dans l'espace de Fock associé à l'état individuel $\mathbf{k} = 0$, les conclusions restent les mêmes pour $|\Phi_B\rangle$.

d'opérateurs de création et d'annihilation adaptés à l'état fondamental. Dans les compléments de ce chapitre, nous utiliserons les états appariés pour étudier divers problèmes, et calculerons en particulier leurs paramètres optimaux adaptés à chaque situation. Bien sûr, les résultats physiques auxquels ils conduisent sont très différents selon les cas, surtout entre fermions ou bosons ; mais l'intérêt des états appariés est qu'ils permettent de les obtenir tous dans un cadre unifié.

COMPLÉMENTS DU CHAPITRE XVII

Le but des deux premiers compléments est de compléter un certain nombre de résultats du chapitre sur les diverses propriétés des opérateurs de paires et des états appariés. Les trois compléments qui suivent présentent des applications physiques concernant les fermions, puis les bosons.

A_{XVII} : OPÉRATEUR CHAMP DE PAIRES DE PARTICULES IDENTIQUES

A_{XVII} : L'opérateur champ de paires est l'analogue, pour une paire de particules, de l'opérateur champ usuel pour une seule particule. Il est bien adapté aux calculs de valeurs moyennes dans un état apparié. Les relations de commutation d'opérateur paires de fermions rappellent celles de bosons, mais le commutateur contient un terme supplémentaire dû au caractère fermionique des constituants de la paire.

B_{XVII} : ÉNERGIE MOYENNE DANS UN ÉTAT APPARIÉ

B_{XVII} : Ce complément présente le calcul de l'énergie moyenne dans un état apparié. Pour des bosons, on y adjoint un condensat décrit par un état cohérent. Les résultats obtenus sont utilisés dans les Compléments C_{XVII} et E_{XVII}.

Ces trois compléments concernent les états appariés pour des systèmes physiques constitués de fermions.

C_{XVII} : APPARIEMENT DE FERMIONS, THÉORIE BCS

C_{XVII} : Même des interactions attractives faibles peuvent complètement modifier l'état fondamental d'un système de fermions, via le mécanisme BCS de formation de paires. Ce complément discute la théorie de ce phénomène, ses effets sur les fonctions de distribution et de corrélation des particules, ainsi que son lien avec la condensation de Bose-Einstein de paires de particules.

D_{XVII} : PAIRES DE COOPER

D_{XVII} : Le modèle simple de Cooper consiste à étudier les états liés de deux particules faiblement attractives, en présence d'une sphère de Fermi qui interdit aux particules d'occuper les états à l'intérieur de cette sphère. Habituellement, il faut une profondeur minimale du puits de potentiel attractif pour que deux particules forment un état lié ; ici, la présence de la sphère de Fermi fait que l'état lié existe toujours, si faible que soit l'attraction. Le modèle de Cooper permet de rendre compte de façon intuitive d'un certain nombre de résultats de la théorie BCS.

EXVII : BOSONS RÉPULSIFS CONDENSÉS

Pour un ensemble de bosons, l'utilisation d'états appariés comme états variationnels conduit aux mêmes résultats que la méthode de Bogolubov en termes de transformation des opérateurs. On peut ainsi obtenir le spectre de Bogolubov, calculer la "déplétion quantique" introduite par les interactions, etc.

Complément A_{XVII}

Opérateur champ de paires de particules identiques

1	Opérateurs de création et d'annihilation de paires . . .	272
1-a	Particules dans le même état de spin	272
1-b	Paires de spin singulet	275
2	Valeurs moyennes dans un état apparié	277
2-a	Valeur moyenne d'un opérateur champ ; fonction d'onde de paires et paramètre d'ordre	277
2-b	Valeur moyenne d'un produit de deux opérateurs de champ ; factorisation du paramètre d'ordre	280
2-c	Application au calcul de la fonction de corrélation (paires singulet)	285
3	Relations de commutation des opérateurs champ . . .	288
3-a	Particules dans le même état de spin	288
3-b	Paires singulet	292

Nous avons introduit dans le Chapitre XVI un opérateur champ $\Psi(\mathbf{r})$ agissant dans l'espace des états d'un système de particules identiques. Cet opérateur a été défini comme une combinaison linéaire des opérateurs d'annihilation associés aux états individuels d'impulsions données. Il s'avère un outil de calcul commode et, en particulier, se prête bien au calcul des fonctions de corrélation. Ensuite, au Chapitre XVII, nous avons montré l'intérêt des états appariés où les particules identiques sont en quelque sorte groupées par deux ; nous avons introduit pour cela des opérateurs de création et d'annihilation de paires de particules dans des états d'impulsion totale bien définie, $A_{\mathbf{K}}^\dagger$ et $A_{\mathbf{K}}$. Il est donc naturel d'envisager également l'introduction d'un opérateur champ de paires de particules, qui sera un opérateur $\Phi_\chi(\mathbf{R})$ détruisant une paire de particules dont le centre de masse est au point \mathbf{R} et l'état interne décrit par la fonction d'onde χ ; son adjoint, $\Phi_\chi^\dagger(\mathbf{R})$, crée une paire de particules dans ce même état. Nous allons dans ce complément définir ces opérateurs et étudier un certain nombre de leurs propriétés.

Au § 1, nous donnons l'expression des opérateurs champ $\Phi_{\chi_n}(\mathbf{R})$ et $\Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R})$ pour des paires se trouvant dans un état orbital quelconque χ_n ; nous envisagerons le cas, soit de particules dans le même état de spin, soit de particules dans un état de spin singulet. Ensuite, au § 2, nous étudierons les valeurs moyennes dans des états appariés des opérateurs champ de paires et de leurs produits. Nous verrons que ces valeurs moyennes présentent des propriétés intéressantes. En particulier, nous ferons apparaître une nouvelle fonction d'onde $\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r})$ que nous appellerons "fonction d'onde de paires", qui n'est pas simplement la fonction d'onde à deux particules $\chi_{\text{paire}}(\mathbf{r})$ ayant servi à construire l'état apparié. Un intérêt de cette fonction d'onde est, comme nous le verrons au § 2-c, qu'elle apparaît explicitement dans la fonction de corrélation binaire de la position des particules. De plus, sa norme est liée au nombre de quantas présents dans le champ de paires condensées. L'origine de cette

fonction de paires résulte du fait que les paires peuvent contribuer collectivement à la création d'un champ dont la valeur moyenne constitue ce que nous appellerons un "paramètre d'ordre". La non-nullité du paramètre d'ordre traduit l'existence d'un champ macroscopique associé aux paires; nous montrerons comment il permet de relier les valeurs moyennes "anormales" (d'opérateurs ne conservant pas le nombre de particules) aux valeurs moyennes normales d'un produit de deux opérateurs de champ $\Phi_{\chi_n}(\mathbf{R})$ et $\Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R})$, qui conserve le nombre de particules. En particulier, au § 2-c, nous utiliserons les propriétés de l'opérateur champ de paires pour obtenir les fonctions de corrélation dans un état apparié BCS, et pour étudier les conséquences de l'existence du champ macroscopique associé aux paires. Enfin, au § 3, nous étudierons les propriétés de commutation de ces opérateurs; nous verrons qu'elles ressemblent à celles de bosons (que les particules constituantes soient des bosons ou des fermions), mais pas complètement, à cause des termes correctifs qui s'ajoutent au commutateur de bosons. Nous verrons que, dans la mesure où les paires sont fortement liées et ont une extension spatiale très petite devant toutes les dimensions caractéristiques du problème, on peut effectivement assimiler les paires à des bosons; mais si ces paires sont peu liées (comme en particulier c'est le cas pour le mécanisme BCS que nous discuterons au Complément C_{XVII}), il n'est pas possible de les considérer comme des entités indissociables: la structure fermionique de leurs composants joue un rôle important qu'il n'est pas possible d'ignorer.

1. Opérateurs de création et d'annihilation de paires

Par analogie avec l'opérateur champ pour les particules composant les paires, nous allons introduire un opérateur champ concernant les paires elles-mêmes. L'adjoint de cet opérateur champ permet de créer directement une paire de particules en un point donné dans un état interne donné; quant à l'opérateur lui-même, il annihile cette même paire.

1-a. Particules dans le même état de spin

Dans le Chapitre XVII, nous avons défini les opérateurs $A_{\mathbf{K}}^\dagger$ et $A_{\mathbf{K}}$ pour des paires de particules sans spin (ou dans le même état de spin) par :

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{K}}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}}^\dagger \\ A_{\mathbf{K}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}^* a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (1)$$

Dans cette expression, $g_{\mathbf{k}}$ est la transformée de Fourier de la fonction d'onde $\chi(\mathbf{r})$ caractérisant la paire :

$$g_{\mathbf{k}} = \frac{1}{L^{3/2}} \int_{L^3} d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

et L est le côté du cube de volume L^3 qui contient le système physique.

Nous généralisons maintenant ces définitions au cas où la paire peut se trouver, non pas dans un seul état interne orbital, mais dans un état quelconque appartenant à une base orthonormée d'états $|\chi_n\rangle$, l'indice n variant de 1 à l'infini; ces états

possèdent chacun une fonction d'onde $\chi_n(\mathbf{r})$ dont la transformée de Fourier est $g_{\mathbf{k}}^n$. Il suffit alors d'ajouter un indice n aux définitions précédentes, par exemple :

$$A_{\mathbf{K},n}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}^n a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}}^\dagger \quad (3)$$

Nous avons vu dans le Chapitre XVII que le caractère bosonique ou fermionique des particules constituant la paire impose que les fonctions $g_{\mathbf{k}}^n$ aient la parité η vis-à-vis de la variable \mathbf{k} , c'est-à-dire $g_{-\mathbf{k}}^n = \eta g_{\mathbf{k}}^n$ avec :

$$\eta = \begin{cases} +1 & \text{pour des bosons} \\ -1 & \text{pour des fermions} \end{cases} \quad (4)$$

On vérifie d'ailleurs par (anti)commutation des opérateurs que l'expression (3) s'annule si $g_{\mathbf{k}}^n$ est de parité $-\eta$; on peut donc se limiter au cas où les $g_{\mathbf{k}}^n$, et donc les fonctions d'onde correspondantes $\chi_n(\mathbf{r})$, sont de parité η . Si cependant l'on désire que la base des états $|\chi_n\rangle$ associée à ces fonctions d'onde soit complète, on peut y inclure des états de parité quelconque ± 1 ; mais il faut alors bien noter que les opérateurs $A_{\mathbf{K},n}^\dagger$ sont nuls dès que l'indice n correspond à une fonction d'onde de parité $-\eta$.

α. Expression de $A_{\mathbf{K},n}^\dagger$ en fonction de l'opérateur champ de particules

La relation (A-10) du Chapitre XVI permet de remplacer les opérateurs de création $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ par :

$$a_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \int d^3r e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \quad (5)$$

où $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ est l'adjoint de l'opérateur champ associé aux constituants élémentaires de la paire (les "atomes" de chaque "molécule"). Si nous effectuons (deux fois) cette substitution dans (3), nous obtenons :

$$A_{\mathbf{K},n}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}L^3} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}^n \int d^3r \int d^3r' e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'} \Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi^\dagger(\mathbf{r}') \quad (6)$$

soit, en prenant comme variables d'intégration $\mathbf{R} = (\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$ et $\mathbf{x} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$:

$$A_{\mathbf{K},n}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}L^3} \int d^3R e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \int d^3x \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}^n e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \Psi^\dagger(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{x}}{2})\Psi^\dagger(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) \quad (7)$$

La somme sur \mathbf{k} dans le membre de droite fait apparaître l'expression (A-2) du Chapitre XVII de la fonction d'onde χ_n , de sorte que :

$$A_{\mathbf{K},n}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}L^3} \int d^3R e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \int d^3x \chi_n(\mathbf{x}) \Psi^\dagger(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{x}}{2})\Psi^\dagger(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) \quad (8)$$

Cette autre forme de l'opérateur déjà introduit en (3) met en évidence le fait que, agissant sur le vide, il crée une paire de particules dans un état moléculaire caractérisé par une onde plane de vecteur d'onde \mathbf{K} (pour ses variables externes) et par la fonction d'onde χ_n (pour ses variables internes).

β . *Champ de paires*

Pour chaque état interne $|\chi_n\rangle$ de la paire, la relation (A-3) du Chapitre XVI permet d'introduire un opérateur $\Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R})$ créant une paire au point \mathbf{R} et dans l'état interne χ_n par :

$$\Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \sum_{\mathbf{K}} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} A_{\mathbf{K},n}^\dagger \quad (9)$$

Remplaçons la variable d'intégration \mathbf{R} par \mathbf{R}' dans (8) et reportons le résultat dans cette égalité ; il vient :

$$\Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{2}L^3} \sum_{\mathbf{K}} \int d^3R' e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}'-\mathbf{R})} \int d^3x \chi_n(\mathbf{x}) \Psi^\dagger(\mathbf{R}' + \frac{\mathbf{x}}{2}) \Psi^\dagger(\mathbf{R}' - \frac{\mathbf{x}}{2}) \quad (10)$$

La somme sur \mathbf{K} de $e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}'-\mathbf{R})}$ fait alors apparaître $L^3\delta(\mathbf{R}-\mathbf{R}')$, ce qui absorbe l'intégration sur d^3R' , et nous obtenons :

$$\Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int d^3x \chi_n(\mathbf{x}) \Psi^\dagger(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{x}}{2}) \Psi^\dagger(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) \quad (11)$$

Cet opérateur est donc un produit d'opérateurs champ créant successivement chacun des deux éléments de la paire, ce qui se comprend bien physiquement ; les deux éléments ne sont cependant pas créés au même point, mais symétriquement par rapport au point \mathbf{R} , et avec une répartition spatiale dont l'amplitude est donnée par la fonction d'onde $\chi(\mathbf{x})$ de la "molécule". La zone de l'espace qui contribue s'étend donc sur une distance comparable à la portée de cette fonction d'onde.

L'opérateur champ de paires lui-même, qui annihile une paire, est défini par conjugaison hermitique de la relation précédente :

$$\Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int d^3x \chi_n^*(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) \Psi(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{x}}{2}) \quad (12)$$

On peut utiliser la relation (A-3) du Chapitre XVI pour revenir à l'utilisation d'opérateurs d'annihilation dans une base d'états individuels d'impulsion donnée. Une fois cette relation insérée (deux fois) dans (12), il vient :

$$\Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}) = \frac{1}{L^3\sqrt{2}} \int d^3x \chi_n^*(\mathbf{x}) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1\cdot(\mathbf{R}-\frac{\mathbf{x}}{2})} e^{i\mathbf{k}_2\cdot(\mathbf{R}+\frac{\mathbf{x}}{2})} a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} \quad (13)$$

Cette relation nous sera utile pour la suite.

γ . *Inversion ; expression de l'énergie d'interaction*

Appelons $|\chi_n\rangle$ les états individuels de fonction d'onde $\chi_n(\mathbf{r})$ et supposons qu'ils forment une base complète. La relation de fermeture sur ces états s'écrit :

$$\sum_n \langle \mathbf{k} | \chi_n \rangle \langle \chi_n | \mathbf{k}' \rangle = \sum_n (g_{\mathbf{k}}^n) (g_{\mathbf{k}'}^n)^* = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (14)$$

Multiplions alors la relation (3) par $(g_{\mathbf{k}'}^n)^*$, puis sommons-la sur n ; nous obtenons :

$$\sum_n (g_{\mathbf{k}'}^n)^* A_{\mathbf{K},n}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}'}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}'}^\dagger \quad (15)$$

Nous pouvons donc inverser les relations (3) et exprimer tout produit de deux opérateurs de création comme une somme d'opérateurs de création de paires, selon l'égalité :

$$a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger = \sqrt{2} \sum_n \left(g_{(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)/2}^n \right)^* A_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,n}^\dagger \quad (16)$$

où nous avons remplacé \mathbf{K} par $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ et \mathbf{k}' par $(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/2$. Par conjugaison hermitique, on obtient une relation semblable pour tout produit $a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4}$ d'opérateurs d'annihilation.

Hamiltonien d'interaction :

Tout opérateur d'interaction binaire entre particules \widehat{W}_{int} peut donc s'écrire :

$$\widehat{W}_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, n, n'} \langle 1 : \mathbf{k}_1; 2 : \mathbf{k}_2 | W_2(1, 2) | 1 : \mathbf{k}_3; 2 : \mathbf{k}_4 \rangle \left(g_{(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)/2}^n \right)^* \left(g_{(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_4)/2}^{n'} \right) A_{\mathbf{K},n}^\dagger A_{\mathbf{K},n'} \quad (17)$$

où $W_2(1, 2)$ est l'interaction binaire entre deux particules (comme, par exemple, dans le Complément E_{XV}) ; la conservation de l'impulsion nous a permis de poser :

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 \quad (18)$$

Ecrit en termes d'opérateurs de création et d'annihilation de paires, \widehat{W}_{int} s'exprime comme une somme de termes quadratiques, et non plus du quatrième degré comme c'était pour le cas des opérateurs de particules individuelles. On prendra toutefois garde à ne pas utiliser la relation (17) sans précautions car, comme nous le verrons au § 3, les opérateurs de création et d'annihilation de paires ne satisfont pas aux relations de commutation habituelles. Il s'ensuit que l'effet d'un opérateur $A_{\mathbf{K},n}$ sur un état apparié obtenu par action de $\left[A_{\mathbf{K}',n}^\dagger \right]^N$ sur le vide ne donne pas nécessairement zéro lorsque $\mathbf{K} \neq \mathbf{K}'$. Les opérateurs de création de paires ne se manipulent pas aussi simplement que des opérateurs de création de particules.

1-b. Paires de spin singulet

Pour des particules de spin 1/2 dans un état de spin singulet, nous utilisons la relation (A-23) du Chapitre XVII qui s'écrit, lorsqu'on y ajoute l'indice n repérant l'état interne orbital de la paire :

$$A_{\mathbf{K},n}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}^n a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k},\uparrow}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \quad (19)$$

Les calculs qui suivent s'appliquent directement aux fermions dans un état singulet, pour lesquels les fonctions $g_{\mathbf{k}}^n$ doivent être paires vis-à-vis de la variable \mathbf{k} . Nous avons cependant noté au Chapitre XVII, dans la remarque (ii) juste avant le § B, qu'ils s'appliquent aussi à des fermions dans un état triplet de spin si $g_{\mathbf{k}}^n$ est impaire ; même si ce cas peut être inclus dans la discussion qui va suivre, pour simplifier nous continuerons toutefois à parler de paires singulet.

$\alpha.$ Expression de $A_{\mathbf{K},n}^\dagger$ en fonction de l'opérateur champ de particules

La relation (A-9) du Chapitre XVI devient ici, compte tenu des indices de spin :

$$a_{\mathbf{k},\nu}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \int d^3r e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Psi_\nu^\dagger(\mathbf{r}) \quad (20)$$

L'insertion de cette égalité dans (19) conduit à :

$$A_{\mathbf{K},n}^\dagger = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}^n \int d^3r \int d^3r' e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'} \Psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}') \quad (21)$$

Comme plus haut, on fait apparaître la fonction d'onde $\chi_n(\mathbf{x})$ en prenant comme variables d'intégration $\mathbf{R} = (\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$ et $\mathbf{x} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$, de sorte que :

$$A_{\mathbf{K},n}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \int d^3R e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \int d^3x \chi_n(\mathbf{x}) \Psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{x}}{2}) \Psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) \quad (22)$$

Agissant sur le vide, cet opérateur crée une paire de particules dans un état moléculaire singulet caractérisé par une onde plane de vecteur d'onde \mathbf{K} (pour ses variables externes) et par la fonction d'onde χ_n (pour ses variables orbitales internes).

$\beta.$ Champ de paires

Insérons maintenant la relation (22) dans (9) ; nous obtenons :

$$\Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{K}} \int d^3R' e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}'-\mathbf{R})} \int d^3x \chi_n(\mathbf{x}) \Psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{R}' + \frac{\mathbf{x}}{2}) \Psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{R}' - \frac{\mathbf{x}}{2}) \quad (23)$$

Comme plus haut, la somme sur \mathbf{K} de l'exponentielle $e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}'-\mathbf{R})}$ fait alors apparaître $L^3\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$, et nous obtenons :

$$\Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) = \int d^3x \chi_n(\mathbf{x}) \Psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{x}}{2}) \Psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) \quad (24)$$

Les mêmes remarques qu'au § 1-a- β s'appliquent : cet opérateur crée successivement les deux éléments de la paire en des points différents, avec des amplitudes de probabilités données par la fonction d'onde interne $\chi_n(\mathbf{x})$ de la distance entre ces points. L'opérateur champ est obtenu par conjugaison hermitique :

$$\Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}) = \int d^3x \chi_n^*(\mathbf{x}) \Psi_\downarrow(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) \Psi_\uparrow(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{x}}{2}) \quad (25)$$

Il sera souvent commode de revenir à l'utilisation d'opérateurs d'annihilation dans une base d'états individuels d'impulsion donnée. Pour cela, on peut utiliser (deux fois) la relation (A-14) du Chapitre XVI, qui conduit à :

$$\Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}) = \frac{1}{L^3} \int d^3x \chi_n^*(\mathbf{x}) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1\cdot(\mathbf{R}-\frac{\mathbf{x}}{2})} e^{i\mathbf{k}_2\cdot(\mathbf{R}+\frac{\mathbf{x}}{2})} a_{\mathbf{k}_1, \downarrow} a_{\mathbf{k}_2, \uparrow} \quad (26)$$

Remarque :

Pour des paires singulet, nous pourrions inverser ces relations comme nous l'avons fait plus haut, et exprimer l'énergie d'interaction en fonction des opérateurs de création et annihilation de paires. C'est cependant un peu plus compliqué dans ce cas que pour des paires dans un même état de spin : comme nous le verrons au § 2-c- α , il faudrait alors faire intervenir un autre opérateur de création de paire (dans un état triplet). Cela alourdirait les notations, et nous nous abstenons de ce calcul.

2. Valeurs moyennes dans un état apparié

Calculons maintenant les valeurs moyennes d'opérateurs champ de paires, ou de produit de deux opérateurs, dans un état apparié tel que défini dans le Chapitre XVII. Pour cela nous allons utiliser les relations (13) ou (26), selon que les particules sont dans le même état de spin ou un état de spin singulet. Dans les deux cas, le calcul de la valeur moyenne dans un état apparié de ces opérateurs demande le calcul des valeurs moyennes de produits d'opérateurs d'annihilation – c'est-à-dire de valeurs moyennes "anormales" telles que nous les avons définies au Chapitre XVII.

2-a. Valeur moyenne d'un opérateur champ ; fonction d'onde de paires et paramètre d'ordre

Les expressions des kets appariés ont été obtenues au § B-2 du Chapitre XVII comme des produits tensoriels d'états de paires qui ne sont pas des états propres des opérateurs nombres d'occupation. Ces paires ont toutes une impulsion totale nulle ; nous supposons donc à partir de maintenant que $\mathbf{K} = 0$. Nous allons voir que le calcul de la valeur moyenne d'un opérateur champ de paires dans ces états permet de faire apparaître une nouvelle fonction d'onde, que nous appellerons "fonction d'onde de paires".

α . Particules dans le même état de spin

Les relations (B-8) et (B-9) du Chapitre XVII donnent alors l'expression du vecteur d'état apparié $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ pour un ensemble d'un grand nombre de particules :

$$|\Psi_{\text{app}}\rangle = \prod_{\otimes \mathbf{k} \in \mathbf{D}} \exp \left\{ \sqrt{2} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right\} |0\rangle \quad (27)$$

La fonction $g_{\mathbf{k}}$ qui sert à construire cet état apparié est a priori totalement indépendante des fonctions $g_{\mathbf{k}}^n$ qui définissent les opérateurs champ de paires. Dans de tels états appariés, les populations des états d'une même paire restent toujours égales ; les seules valeurs moyennes $\langle a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} \rangle$ non nulles sont alors celles pour lesquelles les deux opérateurs d'annihilation agissent sur les deux états d'une même paire, donc d'impulsions opposées. Comme l'impulsion totale des paires est nulle, nous pouvons prendre $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$ dans (13) et obtenir :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}) \rangle &= \frac{1}{L^3 \sqrt{2}} \int d^3x \chi_n^*(\mathbf{x}) \sum_{\mathbf{k}_1} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}} \langle a_{\mathbf{k}_1} a_{-\mathbf{k}_1} \rangle \\ &= \int d^3x \chi_n^*(\mathbf{x}) \phi_{\text{paire}}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (28)$$

où la “fonction d’onde de paires” (non normée) est celle qui a déjà été définie en (D-6) au Chapitre XVII :

$$\phi_{\text{paire}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \phi_{\text{paire}} \rangle = \frac{1}{L^3 \sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \langle a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \rangle \quad (29)$$

Moyennant un changement de signe de la variable de sommation \mathbf{k} , on voit que la fonction d’onde de paires $\bar{\phi}_{\text{paire}}(\mathbf{k})$ en représentation impulsion s’écrit :

$$\bar{\phi}_{\text{paire}}(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k} | \phi_{\text{paire}} \rangle = \frac{1}{L^{3/2} \sqrt{2}} \langle a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \rangle \quad (30)$$

Nous remarquons au passage que la condition $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$ (nullité de l’impulsion totale de chacune des paires) a fait disparaître la dépendance en \mathbf{R} de la valeur moyenne $\langle \Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}) \rangle$.

La valeur moyenne de l’opérateur champ de paires est donc :

$$\langle \Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}) \rangle = \langle \Phi_{\chi_n} \rangle = \langle \chi_n | \phi_{\text{paire}} \rangle \quad (31)$$

Elle est indépendante de \mathbf{R} , comme on pouvait s’y attendre du fait de l’invariance par translation du système. En revanche, elle dépend de l’état interne $|\chi_n\rangle$, et devient maximale si $|\chi_n\rangle$ est égal à l’état normé $|\phi_{\text{paire}}^{\text{norm}}\rangle$ proportionnel à $|\phi_{\text{paire}}\rangle$:

$$|\phi_{\text{paire}}^{\text{norm}}\rangle = \frac{|\phi_{\text{paire}}\rangle}{\sqrt{\langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle}} \quad (32)$$

Ce calcul fait donc apparaître un nouvel état $|\phi_{\text{paire}}\rangle$, différent de l’état $|\chi\rangle$ qui a servi dans le Chapitre XVII à construire l’état apparié $|\Psi_{\text{app}}\rangle$. Si l’on choisit comme premier vecteur de la base $|\chi_1\rangle = |\phi_{\text{paire}}^{\text{norm}}\rangle$, la valeur moyenne du champ est donnée par :

$$\langle \Phi_{\chi_1}(\mathbf{R}) \rangle = \langle \Phi_{\chi_1} \rangle = \sqrt{\langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle} \quad (33)$$

Cette valeur moyenne $\langle \Phi_{\chi_1}(\mathbf{R}) \rangle$ est souvent appelée “paramètre d’ordre des paires” ; sa non-nullité est importante, car elle traduit l’existence d’un champ construit collectivement par les paires. Ici, la valeur moyenne de ce champ ne dépend pas de \mathbf{R} , car l’état apparié a été construit à partir de paires d’impulsion $\mathbf{K} = 0$ dont la fonction d’onde du centre de masse est une constante.

Les valeurs moyennes $\langle a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \rangle$, qui déterminent selon (29) la fonction d’onde de paire, ont été dénommées “valeurs moyennes anormales” au § C-3 du Chapitre XVII, car elles concernent des opérateurs ne conservant pas le nombre de particules. Pour des bosons dans le même état de spin, la relation (C-52) de ce chapitre indique que :

$$\langle a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \rangle = -e^{2i\zeta_{\mathbf{k}}} \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} \quad (34)$$

Bien sûr, on peut se demander l’utilité du calcul d’une valeur moyenne anormale, alors qu’elle ne peut être que nulle dans un état où le nombre total de particules

est déterminé. Nous verrons cependant au § 2-b que ces valeurs moyennes anormales fournissent un outil commode pour calculer les valeurs moyennes d'opérateurs conservant le nombre total de particules, donc plus directement interprétables physiquement.

Pour des bosons, les opérateurs $a_{\mathbf{k}}$ et $a_{-\mathbf{k}}$ commutent, de sorte que la définition (29) montre que la fonction d'onde $\phi_{\text{paire}}(\mathbf{x})$ est paire :

$$\phi_{\text{paire}}(-\mathbf{x}) = \phi_{\text{paire}}(\mathbf{x}) \quad (35)$$

La valeur moyenne (31) du champ est donc nulle pour tout état χ_n de la base dont la fonction d'onde est impaire : le postulat de symétrisation vis-à-vis des constituants de la paire impose que celle-ci ne peut pas se trouver dans un état orbital impair¹.

β. Paires singulet

Pour des fermions dans un état singulet, ce sont les relations (B-11) et (B-12) du Chapitre XVII qui fournissent le vecteur d'état apparié $|\Psi_{BCS}\rangle$:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\otimes \mathbf{k}} \exp \left[g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right] |0\rangle \quad (36)$$

D'autre part, pour obtenir l'opérateur champ, il nous faut selon (26) associer un indice de spin \downarrow à l'état \mathbf{k} , et un indice de spin \uparrow à l'état $-\mathbf{k}$. A nouveau, la valeur moyenne du produit d'opérateurs d'annihilation n'est non nulle que si leurs vecteurs d'onde sont opposés, et la relation (26) conduit alors à :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}) \rangle &= \frac{1}{L^3} \int d^3x \chi_n^*(\mathbf{x}) \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \langle a_{\mathbf{k},\downarrow} a_{-\mathbf{k},\uparrow} \rangle \\ &= \langle \chi_n | \phi_{\text{paire}} \rangle \end{aligned} \quad (37)$$

avec la définition (D-14) du Chapitre XVII de l'état $|\phi_{\text{paire}}\rangle$ non normé de fonction d'onde :

$$\boxed{\phi_{\text{paire}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \phi_{\text{paire}} \rangle = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \langle a_{\mathbf{k},\downarrow} a_{-\mathbf{k},\uparrow} \rangle} \quad (38)$$

De façon équivalente, on peut définir la fonction d'onde de paires en représentation impulsion $\bar{\phi}_{\text{paire}}(\mathbf{k})$ par :

$$\bar{\phi}_{\text{paire}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{L^{3/2}} \langle a_{-\mathbf{k},\downarrow} a_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle \quad (39)$$

Cette fonction d'onde s'interprète comme celle qui définit les variables orbitales d'une paire dans l'état singulet. Comme en (32), on définit le ket normé $|\phi_{\text{paire}}^{\text{norm}}\rangle$. La valeur moyenne (37) du champ est nulle si $|\chi_n\rangle$ est orthogonal à $|\phi_{\text{paire}}^{\text{norm}}\rangle$, maximale pour $|\chi_n\rangle = |\chi_1\rangle = |\phi_{\text{paire}}^{\text{norm}}\rangle$ et vaut alors :

$$\boxed{\langle \Phi_{\chi_1}(\mathbf{R}) \rangle = \langle \Phi_{\chi_1} \rangle = \sqrt{\langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle}} \quad (40)$$

1. Si les particules constituantes de la paire étaient des fermions dans le même état de spin, ces conclusions seraient inversées. La fonction d'onde de paire serait impaire (du fait de l'anticommutation des opérateurs $a_{\mathbf{k}}$ et $a_{-\mathbf{k}}$) ; les valeurs moyennes pour des états internes χ_n pairs seraient nulles.

Ce maximum définit le paramètre d'ordre du système physique, et traduit l'existence d'un champ créé de façon coopérative par les paires. Comme plus haut, l'absence de dépendance en \mathbf{R} de la valeur moyenne est liée à la nullité de l'impulsion totale de chaque paire.

Les valeurs moyennes qui interviennent dans sa définition sont données par la relation (C-42) du Chapitre XVII :

$$\langle a_{\mathbf{k},\downarrow} a_{-\mathbf{k},\uparrow} \rangle = u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} e^{2i\zeta_{\mathbf{k}}} \quad (41)$$

(dans l'état BCS, les $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$ sont des fonctions paires de \mathbf{k}). Nous avons remarqué à la fin du § C-1-a de ce chapitre que, dans le cas particulier où les $\theta_{\mathbf{k}}$ sont, soit nuls, soit égaux à $\pi/2$, le ket apparié se réduit à un état de Fock de particules individuelles, donc un ket sans appariement. Comme (41) s'annule alors, nous constatons que la fonction d'onde de paires s'annule en l'absence d'appariement.

2-b. Valeur moyenne d'un produit de deux opérateurs de champ ; factorisation du paramètre d'ordre

Les opérateurs de champ ne conservent pas le nombre de particules, contrairement aux opérateurs usuels comme l'hamiltonien, l'impulsion totale, la densité double, etc. En revanche, le produit d'opérateurs $\Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}')$ conserve ce nombre, et peut s'avérer un outil plus directement facile à interpréter physiquement pour caractériser les propriétés des paires.

α. Particules dans le même état de spin

La relation (13) fournit maintenant :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle &= \frac{1}{2L^6} \int d^3x \chi_n(\mathbf{x}) \int d^3x' \chi_{n'}^*(\mathbf{x}') \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{R} + \frac{\mathbf{x}}{2})} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2})} e^{i\mathbf{k}_3 \cdot (\mathbf{R}' - \frac{\mathbf{x}'}{2})} e^{i\mathbf{k}_4 \cdot (\mathbf{R}' + \frac{\mathbf{x}'}{2})} \langle a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \rangle \end{aligned} \quad (42)$$

Les intégrales sur d^3x et d^3x' font apparaître des transformées de Fourier $g_{\mathbf{k}}^n$ des fonctions d'onde $\chi_n(\mathbf{x})$:

$$g_{\mathbf{k}}^n = \frac{1}{L^{3/2}} \int d^3x e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \chi_n(\mathbf{x}) \quad (43)$$

Nous avons donc :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle &= \frac{1}{2L^3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} g_n \left(\frac{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2}{2} \right) g_{n'}^* \left(\frac{\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3}{2} \right) \times \\ &\times e^{i[(\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4)\mathbf{R}' - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{R}]} \langle a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \rangle \end{aligned} \quad (44)$$

où, pour la commodité de l'écriture, nous avons noté $g_n(\mathbf{k})$ les transformées de Fourier $g_{\mathbf{k}}^n$.

Calcul de la valeur moyenne $\langle a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \rangle$

Ce calcul est du même type que celui du § D du Chapitre XVII (ou que celui qui sera fait au § 3-a- β du Complément B_{XVII} pour l'énergie d'interaction). Les trois cas suivants sont possibles :

– (I) Termes de “diffusion vers l’avant” obtenus, soit pour $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1$ et $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_2$ (termes directs), soit $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_1$ et $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_2$ (termes d’échange). Nous supposons que ces diffusions vers l’avant concernent deux paires différentes, c’est-à-dire que $\mathbf{k}_1 \neq \pm\mathbf{k}_2$. Comme :

$$\langle a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_1} \rangle = \eta \langle a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} \rangle = \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_1} \rangle \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_2} \rangle \quad (45)$$

leur somme fournit la contribution :

$$\begin{aligned} & \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle_{\text{avant}} \\ &= \frac{1}{2L^3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} g_n(\mathbf{k}) [g_{n'}^*(\mathbf{k}) + \eta g_{n'}^*(-\mathbf{k})] e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{R})} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_1} \rangle \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_2} \rangle \end{aligned} \quad (46)$$

(comme au § D-1-a du Chapitre XVII, nous pouvons considérer les sommes sur \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 comme indépendantes, car l’erreur commise en ignorant la contrainte $\mathbf{k}_1 \neq \pm\mathbf{k}_2$ est négligeable si le volume L^3 est grand) avec la notation :

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k} &= \frac{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2}{2} \end{aligned} \quad (47)$$

Lorsque $g_{n'}(\mathbf{k})$ est de parité η , les deux termes du crochet de (46) se doublent, et l’on obtient la relation plus simple :

$$\langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle_{\text{avant}} = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} g_n(\mathbf{k}) g_{n'}^*(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{R})} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_1} \rangle \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_2} \rangle \quad (48)$$

Ce résultat ne dépend que de la différence $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$ (invariance par translation) ; il tend vers zéro lorsque $|\mathbf{R}' - \mathbf{R}|$ devient plus grand que l’inverse de la largeur de la distribution en impulsion \mathbf{K} de la fonction du second membre de (46), sommée sur la différence des impulsions \mathbf{k} .

– (II) Termes d’annihilation-création de paires différentes, obtenus pour $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1$ et $\mathbf{k}_4 = -\mathbf{k}_3$, avec $\mathbf{k}_4 \neq \pm\mathbf{k}_2$. Leur contribution s’écrit :

$$\begin{aligned} & \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle_{\text{paire-paire}} \\ &= \frac{1}{2L^3} \sum_{\mathbf{k}_1} \langle a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{-\mathbf{k}_1}^\dagger \rangle g_n(\mathbf{k}_1) \sum_{\mathbf{k}_4} \langle a_{-\mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_4} \rangle g_{n'}^*(\mathbf{k}_4) \langle \chi_{n'} | \mathbf{k}_4 \rangle \end{aligned} \quad (49)$$

Or, d’après (30) et la définition (2) des composantes de Fourier de chaque état de paire $|\chi_n\rangle$:

$$\frac{1}{L^{3/2}\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}_4} \langle a_{-\mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_4} \rangle g_{n'}^*(\mathbf{k}_4) = \sum_{\mathbf{k}_4} \langle \mathbf{k}_4 | \phi_{\text{paire}} \rangle \langle \chi_{n'} | \mathbf{k}_4 \rangle = \langle \chi_{n'} | \phi_{\text{paire}} \rangle \quad (50)$$

La somme sur \mathbf{k}_1 se calcule de même, au prix d'une simple conjugaison complexe. Dans le second membre de (49) apparaissent alors deux produits scalaires, et :

$$\langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle_{\text{paire-paire}} = \langle \phi_{\text{paire}} | \chi_n \rangle \langle \chi_{n'} | \phi_{\text{paire}} \rangle \quad (51)$$

Contrairement à la précédente, cette contribution est indépendante de $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$.

– (III) Termes d'annihilation-création de la même paire, obtenus pour $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2 = \pm \mathbf{k}_3 = \mp \mathbf{k}_4$, qui sont un cas particulier des termes de la somme (46) lorsque $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$, et ne nécessitent donc pas de calcul spécifique. Enfin, les termes $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$ que nous avons ignorés en (I) et pour lesquels tous les \mathbf{k} sont égaux, ne contiennent qu'une seule sommation sur les vecteurs d'onde, et sont donc négligeables devant la somme (46) ; nous n'en tiendrons pas compte.

Le total (I) + (II) donne donc :

$$\langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle = \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle_{\text{avant}} + \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle_{\text{paire-paire}} \quad (52)$$

où seul le second terme du second membre ne tend pas vers zéro lorsque $|\mathbf{R}' - \mathbf{R}|$ devient grand, ce qui traduit l'existence d'un ordre non diagonal à grande distance. Selon (51), ce second terme est maximal lorsque les deux états internes $|\chi_n\rangle$ et $|\chi_{n'}\rangle$ sont égaux à l'état $|\phi_{\text{paire}}^{\text{norm}}\rangle$ défini en (32). Il correspond à l'existence du champ coopératif des paires dans l'état externe d'impulsion externe totale $\mathbf{K} = 0$ et dans l'état interne $|\phi_{\text{paire}}^{\text{norm}}\rangle$.

La comparaison de (31) et (51) indique que :

$$\langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle_{\text{paire-paire}} = \langle \Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}) \rangle^* \times \langle \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle \quad (53)$$

La partie paire-paire de la fonction de corrélation à deux points se factorise donc en un produit de deux fonctions de corrélations à un point ; pour $n = 1$, on retrouve la fonction que nous avons appelée "paramètre d'ordre". Comme nous l'avons déjà remarqué au § 2-a- α , le fait que les paires aient été placées dans un état d'impulsion totale nulle explique pourquoi toute dépendance en \mathbf{R} et \mathbf{R}' a disparu des deux membres de (53), mais ce point n'est pas essentiel. Ce qui est plus important est de remarquer que l'introduction d'un tel paramètre d'ordre, qui pourrait a priori paraître peu physique dans la mesure où c'est une valeur moyenne ne conservant pas le nombre de particules, peut en fait se révéler très utile pour le calcul d'autres grandeurs plus physiques. Nous ferons le lien entre la relation de factorisation (53) et le critère de Penrose-Onsager de condensation de Bose-Einstein au § 2-b- γ .

β . Paires singulet

L'utilisation de (26) à la place de (13) conduit alors à une relation très semblable à (42) ; le facteur 1/2 est toutefois absent dans ce cas, et il faut effectuer la substitution :

$$\langle a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \rangle \Rightarrow \langle a_{\mathbf{k}_{1,\uparrow}}^\dagger a_{\mathbf{k}_{2,\downarrow}}^\dagger a_{\mathbf{k}_{3,\downarrow}} a_{\mathbf{k}_{4,\uparrow}} \rangle \quad (54)$$

La relation (44) devient alors :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle &= \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} g_n \left(\frac{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2}{2} \right) g_{n'}^* \left(\frac{\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3}{2} \right) \times \\ &\times e^{i[(\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{R}' - (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{R}]} \left\langle a_{\mathbf{k}_1, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_2, \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_3, \downarrow} a_{\mathbf{k}_4, \uparrow} \right\rangle \end{aligned} \quad (55)$$

Le reste du calcul est très semblable à celui fait ci-dessus. Il s'introduit la somme de plusieurs termes :

– (I) Termes de diffusion vers l'avant obtenus pour $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1$ et $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_2$; dans deux paires différentes, on détruit une particule, puis on la re-crée dans le même état individuel (du fait de la présence des indices de spin, il n'existe pas de terme d'échange dans ce cas). Le calcul est le même que celui qui a mené à (48) pour des particules sans spin ; avec la notation (47) des vecteurs d'onde, on obtient ici :

$$\langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle_{\text{avant}} = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} g_n(\mathbf{k}) g_{n'}^*(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{R})} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_1, \uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_2, \downarrow} \rangle \quad (56)$$

avec la définition (47) de \mathbf{K} et \mathbf{k} .

– (II) Termes d'annihilation-création de paires différentes, obtenus pour $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1$ et $\mathbf{k}_4 = -\mathbf{k}_3$, avec $\mathbf{k}_4 \neq \mathbf{k}_1$. Cette fois, le calcul est le même que celui qui a mené à (51). Le second membre de (55) devient alors :

$$\frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_4} g_n(\mathbf{k}_1) g_{n'}^*(\mathbf{k}_4) \left\langle a_{\mathbf{k}_1, \uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}_1, \downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}_4, \downarrow} a_{\mathbf{k}_4, \uparrow} \right\rangle \quad (57)$$

Compte tenu de la définition (38) de la fonction d'onde de paires dans ce cas, on obtient à nouveau :

$$\langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle_{\text{paire-paire}} = \langle \phi_{\text{paire}} | \chi_n \rangle \langle \chi_{n'} | \phi_{\text{paire}} \rangle \quad (58)$$

Comme précédemment, le fait que l'état apparié ait été construit à partir de paires d'impulsion totale nulle explique pourquoi toute dépendance en \mathbf{R} a disparu de cette valeur moyenne.

– (III) Termes d'annihilation-création de la même paire, obtenus pour $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 = -\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_4$; ils sont en $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}_1, \uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{-\mathbf{k}_1, \downarrow} \rangle$ et déjà inclus dans les termes (I). Les termes où tous les \mathbf{k} sont égaux sont négligés pour la même raison que plus haut.

En résumé, comme plus haut, on trouve donc :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle &= \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle_{\text{avant}} + \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle_{\text{paire-paire}} \\ &= \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle_{\text{avant}} + \langle \Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}) \rangle^* \langle \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle \end{aligned} \quad (59)$$

Au total, nous arrivons aux mêmes résultats que pour des bosons sans spin, avec le même ordre non diagonal à grande distance des paires, ainsi que la factorisation (53) des paramètres d'ordre. Nous verrons dans le Complément C_{XVII} que ce paramètre d'ordre à grande distance est intimement lié à la nature de la transition BCS. Ici aussi, les valeurs moyennes anormales s'avèrent un outil utile pour le calcul de valeurs moyennes normales conservant le nombre de particules.

γ. *Lien avec la condensation de Bose-Einstein de paires*

Il existe un lien étroit entre le paramètre d'ordre des paires et l'existence d'une condensation de Bose-Einstein de paires de particules. Pour le voir, il est commode d'introduire l'opérateur densité à deux particules, en nous limitant pour simplifier au cas où les particules n'ont pas de spin. L'opérateur densité à une particule ρ_I pour un ensemble de particules identiques est donné en fonction de l'opérateur champ par ses éléments de matrice (B-26) au Chapitre XVI :

$$\langle \mathbf{r}', \nu' | \rho_I | \mathbf{r}, \nu \rangle = \langle \Psi_\nu^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_{\nu'}(\mathbf{r}') \rangle \quad (60)$$

où \mathbf{r} est la position de la particule et ν son spin. Pour des paires, on peut écrire par analogie² :

$$\langle \mathbf{R}', \chi_{n'} | \rho_I^{\text{paire}} | \mathbf{R}, \chi_n \rangle = \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle \quad (61)$$

où \mathbf{R} est la position du centre de masse ; χ_n et $\chi_{n'}$ définissent l'état interne de la paire ; l'indice n joue donc un rôle analogue à celui du spin pour une particule unique (même s'il correspond ici à un état orbital interne).

En représentation impulsion, cet opérateur densité a pour éléments de matrice diagonaux :

$$\langle \mathbf{K}', \chi_n | \rho_I^{\text{paire}} | \mathbf{K}', \chi_n \rangle = \frac{1}{L^3} \int d^3 R \int d^3 R' e^{i\mathbf{K}' \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}') \rangle \quad (62)$$

Comme $\langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_{n'}}(\mathbf{R}') \rangle$ ne dépend que de $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$, nous effectuons le changement de variables $\mathbf{X} = \mathbf{R} - \mathbf{R}'$; l'intégrale sur $d^3 R$ s'effectue alors immédiatement et compense le facteur $1/L^3$, de sorte que :

$$\langle \mathbf{K}', \chi_n | \rho_I^{\text{paire}} | \mathbf{K}', \chi_n \rangle = \int d^3 X e^{i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{X}} \langle \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\chi_n}(\mathbf{R} - \mathbf{X}) \rangle \quad (63)$$

Si nous reportons dans ce résultat la relation (52), nous obtenons la somme d'une contribution du terme de diffusion vers l'avant et du terme paire-paire.

(i) Le premier s'obtient par report de (48) dans (63). L'intégrale sur $d^3 X$ fait alors apparaître une fonction delta $\delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'}$ ainsi qu'un facteur L^3 qui compense celui du dénominateur. La somme $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ est alors fixée à la valeur \mathbf{K}' , de sorte que la double sommation sur \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 se réduit à une somme sur \mathbf{k} . On obtient alors :

$$\sum_{\mathbf{k}} |g_n(\mathbf{k})|^2 \langle \hat{n}_{\frac{\mathbf{K}'}{2} + \mathbf{k}} \rangle \langle \hat{n}_{\frac{\mathbf{K}'}{2} - \mathbf{k}} \rangle \quad (64)$$

Ce résultat présente une variation régulière en \mathbf{K}' qui provient de la dépendance en nombre d'onde des nombres d'occupation.

(ii) Le terme paires-paires contient l'intégrale de la fonction (53), qui est un produit de deux paramètres d'ordres constants ; il conduit donc à :

$$\delta_{\mathbf{K}', \mathbf{0}} L^3 |\langle \Phi_{\chi_n} \rangle|^2 \quad (65)$$

2. Comme nous le verrons au § 3, les opérateurs champ de paires ne satisfont pas exactement aux relations de commutation de bosons. L'opérateur (61) n'est donc pas au sens strict un opérateur densité ; pour souligner cette différence, on qualifie parfois ρ_I^{paire} de "quasi-opérateur densité".

La présence de la fonction delta $\delta_{\mathbf{K}',0}$ indique donc que le niveau $\mathbf{K}' = 0$ possède une population (nombre de quanta du champ de paires) supplémentaire, qui n'apparaît pour aucune autre valeur de l'impulsion \mathbf{K}' ; cette population n'est autre que le carré du paramètre d'ordre, multiplié par le volume du système ; elle est donc extensive. C'est l'indication que le système physique est le siège d'une condensation de Bose-Einstein des paires. Le fait que la population correspondante soit proportionnelle au carré du paramètre d'ordre indique bien le lien étroit qui existe entre ordre non diagonal à longue distance, paramètre d'ordre, et existence d'une condensation. La factorisation qui apparaît dans (53) est souvent appelée "critère de condensation de Penrose-Onsager".

2-c. Application au calcul de la fonction de corrélation (paires singulet)

Les valeurs moyennes de produits d'opérateurs de champs de paires sont également utiles pour obtenir les fonctions de corrélation entre particules. Nous allons voir en particulier que la fonction de corrélation G_2 est la somme d'un terme "incohérent", indépendant des positions, et d'un terme cohérent où intervient la fonction d'onde de paires définie plus haut. Afin de ne pas allonger l'exposé, nous nous limitons à la discussion au cas où le système physique étudié est en ensemble de fermions sont décrits par un état apparié de paires singulet³, mais la transposition à celui des particules sans spin ne pose aucun problème particulier.

La relation (24) définit le conjugué de l'opérateur champ de paires en fonction de produits d'opérateurs de création de ses particules constituantes ; nous allons dans un premier temps inverser cette relation.

α. Inversion de la relation entre champs

La relation de fermeture sur la base orthonormée des fonctions d'onde $\chi_p(\mathbf{r})$ avec $p = 1, 2, \dots$ s'écrit :

$$\sum_n \chi_n^*(\mathbf{x}') \chi_n(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (66)$$

Dans cette somme sur n , il faut inclure aussi bien des fonctions orbitales $\chi_n(\mathbf{x})$ paires (le champ de paires Φ_{χ_n} associé décrit alors des fermions appariés dans un état singulet) qu'impaires (le champ de paires décrit des fermions appariés dans un état triplet). Multiplions alors (24) par $\chi_n^*(\mathbf{x}')$ et effectuons la somme sur n . Il apparaît alors sous l'intégrale du second membre la relation de fermeture (66), et il vient :

$$\sum_n \chi_n^*(\mathbf{x}') \Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R}) = \Psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{x}'}{2}) \Psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}'}{2}) \quad (67)$$

Donc :

$$\Psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}_1) \Psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}_2) = \sum_n \chi_n^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Phi_{\chi_n}^\dagger\left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}\right) \quad (68)$$

3. Nous étudierons les bosons condensés au Complément EXVII. Nous verrons alors que les caractéristiques de l'état apparié des états $\mathbf{k} \neq 0$ ne sont pas principalement déterminées par les interactions au sein de cet état apparié, mais par celles avec un condensat $\mathbf{k} = 0$, extérieur à l'état apparié. Il s'agit alors d'un cas complètement différent.

Créer deux particules de spins opposés aux points \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 revient donc à créer une superposition cohérente de paires de centre de masse $(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$, dans un état de spin soit singulet soit triplet, et dont les coefficients sont les fonctions d'onde χ_n^* prises à une position $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

On peut calculer la valeur moyenne de cette expression dans un état apparié en utilisant la relation (37), ce qui conduit à :

$$\left\langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) \right\rangle = \sum_n \chi_n^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \langle \chi_n | \phi_{\text{paire}} \rangle \quad (69)$$

Comme ϕ_{paire} est une fonction paire, on voit immédiatement que seules les χ_n qui sont également paires contribuent à cette valeur moyenne; les champs de paires triplet ont une valeur moyenne nulle dans un état condensé en paires singulet.

Nous pouvons, comme au § 2-a- β , choisir pour les $|\chi_n\rangle$ une base donc le premier ket $|\chi_1\rangle$ coïncide avec le ket de paires normé $|\phi_{\text{paire}}^{\text{norm}}\rangle$. Il vient alors :

$$\left\langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) \right\rangle = \frac{\phi_{\text{paire}}^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{\sqrt{\langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle}} \frac{\langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle}{\sqrt{\langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle}} = \phi_{\text{paire}}^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (70)$$

β . *Fonction de corrélation à 4 points*

Selon (68), la fonction de corrélation à 4 points (pour des spins opposés) peut s'écrire :

$$\begin{aligned} & \left\langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}'_2) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}'_1) \right\rangle \\ &= \sum_{n,n'} \chi_n^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \chi_{n'}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \left\langle \Phi_{\chi_n}^{\dagger} \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \Phi_{\chi_{n'}} \left(\frac{\mathbf{r}'_1 + \mathbf{r}'_2}{2} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (71)$$

Elle s'exprime en fonction des valeurs moyennes de produits d'opérateurs de création et d'annihilation de paires, donc comme des valeurs moyennes de produits de champs pour lesquels l'indice n joue le rôle d'état interne de la "molécule". Nous montrons ci-dessous qu'elle s'écrit :

$$\begin{aligned} \left\langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}'_2) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}'_1) \right\rangle &= G_1(\mathbf{r}_1, \uparrow; \mathbf{r}'_1, \uparrow) \times G_1(\mathbf{r}_2, \downarrow; \mathbf{r}'_2, \downarrow) \\ &+ \phi_{\text{paire}}^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times \phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \end{aligned} \quad (72)$$

où $G_1(\mathbf{r}, \uparrow; \mathbf{r}', \uparrow)$ est la fonction de corrélation non diagonale à une particule, transformée de Fourier de $\langle n_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle$:

$$G_1(\mathbf{r}, \uparrow; \mathbf{r}', \uparrow) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \langle n_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle \quad (73)$$

avec une définition semblable pour $G_1(\mathbf{r}, \downarrow; \mathbf{r}', \downarrow)$, le nombre d'occupation $\langle n_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle$ étant simplement remplacé par $\langle n_{\mathbf{k}, \downarrow} \rangle$; la fonction d'onde de paires ϕ_{paire} a été définie en (38).

La fonction $G_1(\mathbf{r}, \uparrow; \mathbf{r}', \uparrow)$, transformée de Fourier d'une fonction régulière $\langle n_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle$, tend vers zéro si la différence $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ dépasse une certaine limite (microscopique); seuls subsistent alors les termes de la seconde ligne de (72). Supposons donc que les deux positions \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 soient groupées à faible distance, ainsi que les

deux positions \mathbf{r}'_1 et \mathbf{r}'_2 , mais que ces deux groupes de positions soient mutuellement éloignés. La fonction de corrélation non diagonale se factorise alors en un produit de fonctions ϕ_{paire} , et l'on retrouve alors une situation qui rappelle fortement le critère de Penrose-Onsager de condensation de Bose-Einstein pour des bosons (Complément A_{XVI}, § 3-a), mais au niveau de la fonction de corrélation non diagonale à quatre points au lieu de deux. Puisque la norme de ϕ_{paire} est le paramètre d'ordre, le rôle important de ce paramètre apparaît ici aussi.

Un cas particulier important de la fonction de corrélation à 4 points est la fonction de corrélation (diagonale) à deux corps pour des spins opposés :

$$G_2(\mathbf{r}_1, \uparrow; \mathbf{r}_2, \downarrow) = \left\langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}_1) \right\rangle \quad (74)$$

L'intensité du champ de paires s'écrit donc :

$$\begin{aligned} G_2(\mathbf{r}_1, \uparrow; \mathbf{r}_2, \downarrow) &= \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_1, \uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_2, \downarrow} \rangle + |\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|^2 \\ &= \frac{\langle \widehat{N}_{\uparrow} \rangle \langle \widehat{N}_{\downarrow} \rangle}{L^6} + |\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|^2 \end{aligned} \quad (75)$$

Nous retrouvons donc la relation (D-17) du Chapitre XVII, par une autre méthode. La fonction de corrélation à deux corps est la somme d'une contribution indépendante des positions, ne comportant aucune corrélation, et du carré du module de la fonction d'onde de paires. Cette seconde contribution provient du terme qui, pour les paires, traduit l'existence d'un ordre non diagonal à grande distance (condensation de Bose-Einstein). Il s'agit là d'une propriété importante qui est à la base du mécanisme BCS, et sur laquelle nous reviendrons plus en détail dans le Complément B_{XVII}.

Démonstration :

Nous pouvons reporter dans (71) les relations (56) et (58). Dans le terme de diffusion vers l'avant apparaît l'expression suivante :

$$\begin{aligned} &\sum_{n, n'} \chi_n^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \chi_{n'}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) g_n(\mathbf{k}) g_{n'}^*(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}'_1 + \mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/2} \\ &= \sum_{n, n'} \langle \chi_n | \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \rangle \langle \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2 | \chi_{n'} \rangle \langle \mathbf{k} | \chi_n \rangle \langle \chi_{n'} | \mathbf{k} \rangle e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}'_1 + \mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/2} \\ &= \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \rangle \langle \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2 | \mathbf{k} \rangle e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}'_1 + \mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/2} \\ &= \frac{1}{L^3} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot (\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2} e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \cdot (\mathbf{r}'_1 + \mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/2} \\ &= \frac{1}{L^3} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_1)} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_2)} \end{aligned} \quad (76)$$

où \mathbf{k} et \mathbf{K} sont définis en (47). Par insertion dans (71), nous obtenons alors le premier terme du second membre de (72).

Le terme d'annihilation-création de paires (58) fournit pour sa part :

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}'_2) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}'_1) \right\rangle_{\text{paire-paire}} \\
 &= \sum_{n, n'} \chi_n^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \chi_{n'}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \langle \phi_{\text{paire}} | \chi_n \rangle \langle \chi_{n'} | \phi_{\text{paire}} \rangle \\
 &= \sum_{n, n'} \langle \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2 | \chi_{n'} \rangle \langle \chi_n | \phi_{\text{paire}} \rangle \times \langle \phi_{\text{paire}} | \chi_n \rangle \langle \chi_n | \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \rangle \\
 &= \phi_{\text{paire}}^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times \phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \tag{77}
 \end{aligned}$$

et nous obtenons donc bien le second terme du second membre de (72). Seuls les champs de paire singulet (associés à des fonctions χ_n paires) contribuent à ce terme.

3. Relations de commutation des opérateurs champ

Nous étudions maintenant les relations de commutation entre les opérateurs champ de paires que nous avons définis plus haut. Le “théorème spin-statistique” (Chapitre XIV, § C.1) indique que les particules de spin entier sont des bosons, celles de spin demi-entier des fermions. Considérons donc deux fermions appariés ; les règles de composition du moment cinétique (Chapitre X) indiquent que le spin du système composite ainsi obtenu est nécessairement entier. Intuitivement, on pourrait donc penser que tout ensemble de deux fermions liés se comporte comme un boson ; le but de cette dernière partie est de discuter cette question en examinant les relations de commutations entre opérateurs $A_{\mathbf{K}}$ et $A_{\mathbf{K}}^{\dagger}$. Nous mettrons ainsi en évidence les corrections qu'introduit la structure fermionique sous-jacente.

3-a. Particules dans le même état de spin

Nous commençons par le cas simple des particules sans spin, qui permet de comprendre l'essentiel des propriétés de commutation intéressantes des opérateurs de paires. Si les paires créées et annihilées par les opérateurs $A_{\mathbf{K}}$ et $A_{\mathbf{K}'}$ étaient vraiment des bosons, le commutateur de ces deux opérateurs devrait être égal à $\delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}$. Nous allons voir que le commutateur contient effectivement un tel terme, mais qu'il s'y ajoute des corrections.

α. Relations de commutation des $A_{\mathbf{K},n}$

Tout produit de deux opérateurs de création commute avec tout produit de deux opérateurs de création (pour des fermions, deux signes moins se compensent quand se croisent des produits de deux opérateurs) ; il en est de même pour deux produits de deux opérateurs d'annihilation. Nous avons donc :

$$\begin{aligned}
 [A_{\mathbf{K},n}^{\dagger}, A_{\mathbf{K}',n'}^{\dagger}] &= 0 \\
 [A_{\mathbf{K},n}, A_{\mathbf{K}',n'}] &= 0 \tag{78}
 \end{aligned}$$

Reste alors à calculer le commutateur de $A_{\mathbf{K},n}$ et $A_{\mathbf{K}',n'}^{\dagger}$:

$$[A_{\mathbf{K},n}, A_{\mathbf{K}',n'}^{\dagger}] = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}}^n)^* \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'}^{n'} \left[a_{\frac{\mathbf{k}}{2} - \mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{k}}{2} + \mathbf{k}}, a_{\frac{\mathbf{k}'}{2} + \mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\frac{\mathbf{k}'}{2} - \mathbf{k}'}^{\dagger} \right] \tag{79}$$

Nous montrons ci-dessous (§ 3-a-β) que :

$$\begin{aligned} [A_{\mathbf{K},n}, A_{\mathbf{K}',n'}^\dagger] &= \delta_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} \delta_{n,n'} + 2\eta \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}}^n)^* g_{\frac{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}{2}+\mathbf{k}}^{n'} a_{\mathbf{K}'-(\mathbf{K}/2)-\mathbf{k}}^\dagger a_{(\mathbf{K}/2)-\mathbf{k}} \\ &= \delta_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} \delta_{n,n'} + 2\eta \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \left(g_{\boldsymbol{\kappa}-\frac{\mathbf{K}}{2}}^n\right)^* g_{\boldsymbol{\kappa}-\frac{\mathbf{K}'}{2}}^{n'} a_{\mathbf{K}'-\boldsymbol{\kappa}}^\dagger a_{\mathbf{K}-\boldsymbol{\kappa}} \end{aligned} \quad (80)$$

(dans la seconde ligne, nous avons posé $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k} + \mathbf{K}/2$ et utilisé la parité η de la fonction g) ; si besoin est, on peut faire disparaître le coefficient η du second membre à condition de changer le signe de l'indice inférieur de g (ou de celui de g^*).

Le second membre de (80) contient un premier terme $\delta_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} \delta_{n,n'}$, qui reproduit exactement le commutateur de deux bosons pouvant se trouver dans des états internes n et n' (états de spin par exemple) : ce commutateur n'est non nul que si, à la fois, les variables externes et internes coïncident (dans le cas présent, ces états internes sont cependant de nature orbitale). Ce premier terme est toutefois suivi d'un terme additionnel qui montre que la structure fermionique des paires continue à jouer un rôle. C'est d'ailleurs un opérateur à une particule au sens défini au § B du chapitre XV ; la relation (B-12) de ce chapitre permet de calculer les éléments de matrice de l'opérateur correspondant \hat{f} . Le fait que le terme additionnel contienne des opérateurs de création et d'annihilation dans l'ordre normal montre qu'il s'anule à la limite des populations des états individuels qui tendent vers zéro ; dans cette limite, les paires sont assimilables à des bosons.

Lorsque $\mathbf{K}' = \mathbf{K}$ et $n = n'$ (mêmes états internes et externes pour les paires), on obtient la relation plus simple :

$$[A_{\mathbf{K},n}, A_{\mathbf{K},n}^\dagger] = 1 + 2\eta \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \left|g_{\boldsymbol{\kappa}-\frac{\mathbf{K}}{2}}^n\right|^2 \hat{n}_{\mathbf{K}-\boldsymbol{\kappa}} \quad (81)$$

avec la définition habituelle de l'opérateur population $\hat{n}_{\mathbf{k}}$:

$$\hat{n}_{\mathbf{k}} = a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad (82)$$

Les corrections à une commutation purement bosonique sont alors proportionnelles aux populations des états individuels (états des particules constituant les paires), ce qui confirme que ces corrections deviennent négligeables dans la limite où la somme de ces populations est suffisamment faible.

β. Démonstration

Dans un premier temps, évaluons le commutateur :

$$[a_1 a_2, a_3^\dagger a_4^\dagger] = a_1 a_2 a_3^\dagger a_4^\dagger - a_3^\dagger a_4^\dagger a_1 a_2 \quad (83)$$

où 1, 2, 3, 4 sont des indices repérant des états individuels quelconques. Nous avons :

$$\begin{aligned} a_1 a_2 a_3^\dagger a_4^\dagger &= \delta_{23} a_1 a_4^\dagger + \eta a_1 a_3^\dagger a_2 a_4^\dagger \\ &= \delta_{23} a_1 a_4^\dagger + \eta \delta_{13} a_2 a_4^\dagger + a_3^\dagger a_1 a_2 a_4^\dagger \\ &= \delta_{23} a_1 a_4^\dagger + \eta \delta_{13} a_2 a_4^\dagger + \delta_{24} a_3^\dagger a_1 + \eta a_3^\dagger a_1 a_4^\dagger a_2 \\ &= \delta_{23} a_1 a_4^\dagger + \eta \delta_{13} a_2 a_4^\dagger + \delta_{24} a_3^\dagger a_1 + \eta \delta_{14} a_3^\dagger a_2 + a_3^\dagger a_4^\dagger a_1 a_2 \end{aligned} \quad (84)$$

de sorte que :

$$\left[a_1 a_2, a_3^\dagger a_4^\dagger \right] = \delta_{23} a_1 a_4^\dagger + \delta_{24} a_3^\dagger a_1 + \eta \left[\delta_{13} a_2 a_4^\dagger + \delta_{14} a_3^\dagger a_2 \right] \quad (85)$$

Mettons maintenant tous les opérateurs dans l'ordre normal ; il vient ⁴ :

$$\left[a_1 a_2, a_3^\dagger a_4^\dagger \right] = \delta_{23} \delta_{14} + \eta \delta_{13} \delta_{24} + \delta_{24} a_3^\dagger a_1 + \delta_{13} a_4^\dagger a_2 + \eta \left[\delta_{23} a_4^\dagger a_1 + \delta_{14} a_3^\dagger a_2 \right] \quad (86)$$

Le commutateur qui apparaît au second membre de (79) est donc égal à :

$$\begin{aligned} & \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} + \eta \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} + \left[\delta_{(\mathbf{K}-\mathbf{K}')/2, -\mathbf{k}-\mathbf{k}'} a_{(\mathbf{K}'/2)+\mathbf{k}}^\dagger a_{(\mathbf{K}/2)-\mathbf{k}} \right. \\ & + \delta_{(\mathbf{K}-\mathbf{K}')/2, \mathbf{k}+\mathbf{k}'} a_{(\mathbf{K}'/2)-\mathbf{k}'}^\dagger a_{(\mathbf{K}/2)+\mathbf{k}} \\ & \left. + \eta \delta_{(\mathbf{K}-\mathbf{K}')/2, \mathbf{k}'-\mathbf{k}} a_{(\mathbf{K}'/2)-\mathbf{k}'}^\dagger a_{(\mathbf{K}/2)-\mathbf{k}} + \eta \delta_{(\mathbf{K}-\mathbf{K}')/2, \mathbf{k}-\mathbf{k}'} a_{(\mathbf{K}'/2)+\mathbf{k}'}^\dagger a_{(\mathbf{K}/2)+\mathbf{k}} \right] \end{aligned} \quad (87)$$

Si nous reportons les deux premiers termes dans (79), nous obtenons la contribution suivante au commutateur $\left[A_{\mathbf{K}, n}, A_{\mathbf{K}', n'}^\dagger \right]$:

$$\frac{1}{2} \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}}^n)^* \left[g_{\mathbf{k}}^{n'} + \eta g_{-\mathbf{k}}^{n'} \right] = \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}}^n)^* g_{\mathbf{k}}^{n'} = \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \delta_{n, n'} \quad (88)$$

où nous avons tenu compte de la parité en \mathbf{k} des fonctions $g_{\mathbf{k}}^n$, indiquée dans la relation (A-4) du Chapitre XVII, et du fait que les états internes sont orthonormés. Comme mentionné plus haut, ce $\delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \delta_{n, n'}$ est exactement celui que l'on attend pour la relation de commutation de bosons.

Il est cependant suivi dans (87) de quatre autres termes, qui s'écrivent :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}}^n)^* g_{-\frac{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}{2}-\mathbf{k}}^{n'} a_{\mathbf{K}'-(\mathbf{K}/2)-\mathbf{k}}^\dagger a_{(\mathbf{K}/2)-\mathbf{k}} \\ & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}}^n)^* g_{\frac{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}{2}-\mathbf{k}}^{n'} a_{\mathbf{K}'-(\mathbf{K}/2)+\mathbf{k}}^\dagger a_{(\mathbf{K}/2)+\mathbf{k}} \\ & \frac{\eta}{2} \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}}^n)^* g_{\frac{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}{2}+\mathbf{k}}^{n'} a_{\mathbf{K}'-(\mathbf{K}/2)-\mathbf{k}}^\dagger a_{(\mathbf{K}/2)-\mathbf{k}} \\ & \frac{\eta}{2} \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}}^n)^* g_{-\frac{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}{2}+\mathbf{k}}^{n'} a_{\mathbf{K}'-(\mathbf{K}/2)+\mathbf{k}}^\dagger a_{(\mathbf{K}/2)+\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (89)$$

Dans chacun d'entre eux, on peut changer le signe de l'indice muet de sommation \mathbf{k} sans modifier le résultat, ou encore effectuer des changements de signes dans les indices des fonctions g ou g^* (moyennant l'introduction d'un facteur η). Ainsi, dans le second terme, on peut changer le signe des indices des deux fonctions g et g^* (deux facteurs η se compensent alors), puis changer l'indice de sommation \mathbf{k} en $-\mathbf{k}$: on voit alors que ce second terme double le premier. Pour le troisième terme, il suffit de changer le signe de l'indice $(\mathbf{K}-\mathbf{K}')/2+\mathbf{k}$ de la fonction g (ce qui introduit un facteur η compensant celui déjà présent) pour reproduire le premier terme. Enfin, pour le quatrième, une opération de parité de la fonction g^* suivie d'un changement de l'indice de sommation \mathbf{k} en $-\mathbf{k}$ le rend égal au premier. Les

4. Comme $\left[a_i, a_j^\dagger \right]_{-\eta} = \delta_{ij}$, on a $a_i a_j^\dagger = \eta a_j^\dagger a_i + \delta_{ij}$.

quatre termes sont donc égaux ; si nous choisissons par exemple la forme du troisième et, si nous remplaçons l'indice de sommation \mathbf{k} par $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k} + \mathbf{K}/2$, nous obtenons bien (80).

$\gamma.$ *Relations de commutation des opérateurs champ de paires*

Pour les mêmes raisons que celles invoquées plus haut (commutation de tout produit de deux opérateurs d'annihilation), les opérateurs $\Phi_{\chi_n}(\mathbf{R})$ commutent tous entre eux ; il en est de même des opérateurs adjoints $\Phi_{\chi_n}^\dagger(\mathbf{R})$. Il nous reste à examiner les relations entre les $\Phi_{\chi_n}(\mathbf{R})$ et les $\Phi_{\chi_{n'}}^\dagger(\mathbf{R}')$. Les relations (11) et (12) indiquent que :

$$\begin{aligned} [\Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}), \Phi_{\chi_{n'}}^\dagger(\mathbf{R}')] = & \\ & \frac{1}{2} \int d^3x \chi_n^*(\mathbf{x}) \int d^3x' \chi_{n'}(\mathbf{x}') \\ & \left[\Psi(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) \Psi(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{x}}{2}), \Psi^\dagger(\mathbf{R}' + \frac{\mathbf{x}'}{2}) \Psi^\dagger(\mathbf{R}' - \frac{\mathbf{x}'}{2}) \right] \end{aligned} \quad (90)$$

Le calcul, que nous n'expliciterons pas (mais qui ne présente pas de difficulté particulière), conduit à :

$$\begin{aligned} [\Phi_{\chi_n}(\mathbf{R}), \Phi_{\chi_{n'}}^\dagger(\mathbf{R}')] & \\ = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \delta_{n,n'} & \\ + 16 \int d^3x \chi_n^*[\mathbf{x}] \chi_{n'}[2(\mathbf{R}' - \mathbf{R}) - \mathbf{x}] \Psi^\dagger(2\mathbf{R}' - \mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) \Psi(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) & \\ = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \delta_{n,n'} & \\ + 16 \int d^3z \chi_n^*(\mathbf{R}' - \mathbf{R} - \mathbf{z}) \chi_{n'}(\mathbf{R}' - \mathbf{R} + \mathbf{z}) & \\ \times \Psi^\dagger(\frac{\mathbf{R} + \mathbf{R}' + \mathbf{z}}{2} + \mathbf{R}' - \mathbf{R}) \Psi(\frac{\mathbf{R} + \mathbf{R}' + \mathbf{z}}{2} + \mathbf{R} - \mathbf{R}') & \end{aligned} \quad (91)$$

Dans la seconde forme du commutateur, plus symétrique, nous avons utilisé la notation $\mathbf{z} = \mathbf{R}' - \mathbf{R} - \mathbf{x}$. Ces relations sont les équivalentes en représentation position des relations de commutation (80) en représentation impulsion (comme nous l'avons déjà noté, il est possible de faire apparaître ou disparaître un facteur η devant l'intégrale en changeant le signe de la variable d'une des deux fonctions χ_n^* ou $\chi_{n'}$).

Le commutateur comprend donc plusieurs termes. En premier lieu, un terme en $\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \delta_{n,n'}$, qui est celui de la relation de commutation d'un champ bosonique habituel (ceci reste vrai, que les constituants de la paire soient des bosons ou des fermions) ; le $\delta_{n,n'}$ traduit le fait que des composantes du champ relatives à des états internes orbitaux différents des paires commutent. A ce terme s'ajoute une correction qui dépend de la structure de la paire caractérisée par les fonctions $\chi_n(\mathbf{r})$ et $\chi_{n'}(\mathbf{r})$. Nous retrouvons donc ce que nous avons déjà obtenu plus haut : un premier terme bosonique simple, qui ne tient compte que des échanges simultanés des deux constituants d'une "molécule" avec les deux d'une autre. Ce terme est suivi d'une correction introduite par la possibilité d'autres échanges que ceux par paires complètes. On remarque que cette correction s'exprime en fonction des opérateurs

champ des constituants élémentaires, et non des paires; ceci illustre également que ce sont ces constituants eux-mêmes qui interviennent. C'est un opérateur à une particule non diagonal en représentation position, puisqu'il détruit une particule en un point \mathbf{r} et en re-crée une au point $\mathbf{r} + \mathbf{2}(\mathbf{R}' - \mathbf{R})$, toujours situé à la même distance.

Pour simplifier, supposons que les dimensions des "molécules" qui définissent le champ de paires pour les deux états internes n et n' concernés soient de l'ordre d'une même dimension a_0 ; les fonctions d'onde $\chi_n(r)$ et $\chi_{n'}(r)$ s'annulent lorsque $r \gg a_0$. Dans (91), les valeurs de \mathbf{x} qui contribuent à l'intégrale sont celles pour lesquelles aucune des deux fonctions $\chi_n^*[\mathbf{x}]$ et $\chi_{n'}[2(\mathbf{R} - \mathbf{R}') - \mathbf{x}]$ ne prend de valeur négligeable; pour cela il faut que, ni $|\mathbf{x}|$, ni $|2(\mathbf{R} - \mathbf{R}') - \mathbf{x}|$, ne soient grands devant a_0 . Cette double condition impose que $|\mathbf{R} - \mathbf{R}'| \simeq a_0$, cas auquel il existe des valeurs de \mathbf{x} pour lesquelles les deux fonctions prennent simultanément des valeurs importantes; la correction au commutateur n'est alors pas négligeable. En revanche, si $|\mathbf{R} - \mathbf{R}'| \gg a_0$, il n'existe pas de recouvrement entre les domaines où chacune des deux fonctions χ_n^* et $\chi_{n'}$ prend des valeurs significatives; l'intégrale sur d^3z prend alors une valeur très faible. Ainsi, la portée a_0 de la fonction d'onde des molécules joue également le rôle de portée de la correction au commutateur.

La limite $a_0 \rightarrow 0$ peut être obtenue en prenant les fonctions χ proportionnelles à une fonction δ^ε (Appendice II, § 1.b), de largeur tendant vers zéro lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$ et d'intégrale unité (prenant dans un domaine de volume de l'ordre de ε^3 des valeurs de l'ordre de $1/\varepsilon^3$). Supposons pour simplifier que $n' = n$; comme c'est le carré de la fonction χ_n qui est normalisé à 1 (et non pas la fonction elle-même), ici il faut prendre :

$$\chi_n(\mathbf{r}) \simeq \varepsilon^{3/2} \delta^\varepsilon(\mathbf{r}) \quad (92)$$

Avec cette substitution, l'intégrale sur d^3z de (91) fait apparaître une fonction de convolution de deux fonctions delta, ce qui introduit une fonction $\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ multipliée par l'opérateur $\Psi^\dagger(\mathbf{R})\Psi(\mathbf{R})$; le coefficient ε^3 de ce terme donne cependant zéro à la limite où $\varepsilon \rightarrow 0$. Ainsi, si la taille des molécules est extrêmement faible devant toutes les longueurs caractéristiques du système (par exemple la distance entre molécules), les relations de commutation de l'opérateur champ sont-elles exactement celles de champs associés à des bosons.

La conclusion de cette analyse est que, lorsque les "molécules" n'ont aucun recouvrement spatial⁵, les seuls échanges qui jouent un rôle sont par paires de leurs constituants; en revanche, quand les deux molécules ont un recouvrement, tous les échanges individuels entre leurs constituants deviennent possibles. Si les molécules sont peu liées, comme dans l'exemple du mécanisme BCS d'appariement de fermions (Complément C_{XVII}), il n'est pas possible de les traiter comme des bosons sans structure, et la formule complète (91) du commutateur doit alors être utilisée.

3-b. Paires singulet

Étudions maintenant le cas de particules dans une paire singulet, comme au § 1-b.

5. Ceci n'exclut pas que la distance entre ces molécules soit petite ou comparable à la longueur d'onde de de Broglie de leurs centres de masse.

$\alpha.$ *Relations de commutation des $A_{\mathbf{K},n}$*

Comme plus haut, tous les produits de deux opérateurs de création commutent avec tous les produits de deux opérateurs de création ; il en est de même pour tous les produits de deux opérateurs d'annihilation. Les relations (78) sont donc encore satisfaites. Pour le commutateur, il s'écrit :

$$\left[A_{\mathbf{K},n}, A_{\mathbf{K}',n'}^\dagger \right] = \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}}^n)^* \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'}^{n'} \left[a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k},\downarrow} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k},\uparrow}, a_{\frac{\mathbf{K}'}{2}+\mathbf{k}',\uparrow} a_{\frac{\mathbf{K}'}{2}-\mathbf{k}',\downarrow} \right] \quad (93)$$

Nous allons montrer que :

$$\begin{aligned} \left[A_{\mathbf{K},n}, A_{\mathbf{K}',n'}^\dagger \right] &= \delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} \delta_{n,n'} \\ &+ \eta \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}}^n)^* g_{\frac{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}{2}+\mathbf{k}}^{n'} \left[a_{\mathbf{K}'-(\mathbf{K}/2)-\mathbf{k},\downarrow} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k},\downarrow} + a_{\mathbf{K}'-(\mathbf{K}/2)-\mathbf{k},\uparrow} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k},\uparrow} \right] \\ &= \delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} \delta_{n,n'} + \eta \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \left(g_{\boldsymbol{\kappa}-\frac{\mathbf{K}}{2}}^n \right)^* g_{\boldsymbol{\kappa}-\frac{\mathbf{K}'}{2}}^{n'} \left[a_{\mathbf{K}'-\boldsymbol{\kappa},\downarrow} a_{\mathbf{K}-\boldsymbol{\kappa},\downarrow} + a_{\mathbf{K}'-\boldsymbol{\kappa},\uparrow} a_{\mathbf{K}-\boldsymbol{\kappa},\uparrow} \right] \end{aligned} \quad (94)$$

(avec, dans la dernière ligne, la notation $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k} + \mathbf{K}/2$). Ici aussi, nous trouvons donc que le commutateur des deux opérateurs $A_{\mathbf{K},n}$ et $A_{\mathbf{K}',n'}^\dagger$ comprend, en premier lieu un terme purement bosonique, puis des corrections contenant des opérateurs dans l'ordre normal (qui s'annulent à la limite des faibles nombres d'occupation) ; une correction s'ajoute pour chacun des deux états de spin.

Démonstration :

Pour montrer (94), utilisons à nouveau la relation (86). Comme les indices 1, 2, 3 et 4 symbolisent l'ensemble des nombres quantiques associés à un état individuel, ils contiennent maintenant les indices de spin ; ces derniers s'ajoutent à ceux des impulsions, qui jouent le même rôle que dans le calcul précédent. Il s'ensuit que les états 1 et 3 sont toujours orthogonaux, ainsi que les états 2 et 4 ; seuls subsistent donc dans le second membre de (86) les termes en δ_{23} et δ_{14} , de sorte que :

$$\begin{aligned} \left[A_{\mathbf{K},n}, A_{\mathbf{K}',n'}^\dagger \right] &= \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}}^n)^* \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'}^{n'} \left[\delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \right. \\ &\left. + \eta \left(\delta_{(\mathbf{K}-\mathbf{K}')/2, \mathbf{k}'-\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}'}{2}-\mathbf{k}',\downarrow} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k},\downarrow} + \delta_{(\mathbf{K}-\mathbf{K}')/2, \mathbf{k}-\mathbf{k}'} a_{\frac{\mathbf{K}'}{2}+\mathbf{k}',\uparrow} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k},\uparrow} \right) \right] \end{aligned} \quad (95)$$

soit encore (puisque la base des fonctions $g_{\mathbf{k}}^n$ est orthonormée) :

$$\begin{aligned} &\delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} \delta_{n,n'} \\ &+ \eta \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}}^n)^* \left[g_{\frac{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}{2}+\mathbf{k}}^{n'} a_{\mathbf{K}'-(\mathbf{K}/2)-\mathbf{k},\downarrow} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k},\downarrow} \right. \\ &\quad \left. + g_{-\frac{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}{2}+\mathbf{k}}^{n'} a_{\mathbf{K}'-(\mathbf{K}/2)+\mathbf{k},\uparrow} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k},\uparrow} \right] \end{aligned} \quad (96)$$

Nous modifions alors le second terme dans le crochet de la somme pour le rendre semblable au premier : les fonctions $g_{\mathbf{k}}^n$ étant de parité définie ($-\eta$) vis-à-vis de \mathbf{k} , on peut changer le signe des indices de g et g^* , puis le signe de l'indice muet de sommation \mathbf{k} . La seule différence entre les deux termes est alors la direction des spins, et ceci permet d'obtenir (94).

β . *Relations de commutation des opérateurs champ de paires*

Un calcul semblable à celui qui a mené à (91) permet d'obtenir :

$$\begin{aligned} [\Phi_\chi(\mathbf{R}), \Phi_\chi^\dagger(\mathbf{R}')] &= \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \delta_{n,n'} \\ &+ 8\eta \int d^3x \chi_n^*(\mathbf{x}) \chi_{n'} [2(\mathbf{R}' - \mathbf{R}) - \mathbf{x}] \\ &\times \left[\Psi_\downarrow^\dagger(2\mathbf{R}' - \mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) \Psi_\downarrow(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) + \Psi_\uparrow^\dagger(2\mathbf{R}' - \mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) \Psi_\uparrow(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}) \right] \end{aligned} \quad (97)$$

(on peut ici aussi utiliser la notation $\mathbf{z} = \mathbf{R}' - \mathbf{R} - \mathbf{x}$ pour obtenir une forme plus symétrique du second membre). Le commutateur est donc la somme de celui de bosons élémentaires et d'une correction ; cette dernière s'étend sur une distance $\mathbf{R}' - \mathbf{R}$ de l'ordre de la portée des fonctions d'onde χ , et prend la forme d'une somme de contributions indépendantes des deux états de spin.

Conclusion

En conclusion de ce complément, l'opérateur champ de paires permet de jeter un éclairage intéressant sur les propriétés physiques des états appariés à un grand nombre de particules. Dans un état à N particules construit à partir d'une fonction d'onde à deux particules χ , il permet de voir comment apparaît une nouvelle fonction d'onde ϕ lorsque l'indiscernabilité des particules est prise en compte. Dans le cadre de la théorie BCS, nous verrons comment cette fonction d'onde de paires fournit une caractérisation des effets coopératifs d'interaction entre paires. L'introduction d'un paramètre d'ordre est également utile pour mettre en évidence le lien entre valeurs moyennes anormales (ne conservant pas le nombre de particules) et valeurs moyennes normales. Les résultats prennent des formes différentes pour des bosons ou des fermions dans des états appariés. Une grande analogie existe cependant entre les deux cas, ce qui fournit un cadre unifié pour aborder des phénomènes différents, par exemple la condensation de Bose-Einstein de particules ou de paires.

Complément B_{XVII}

Energie moyenne dans un état apparié

1	Utilisation d'états qui ne sont pas états propres du nombre total de particules	295
	1-a Calcul des valeurs moyennes	296
	1-b Une bonne approximation	297
2	Hamiltonien	297
	2-a Expression de l'opérateur	297
	2-b Simplifications dues à l'appariement	300
3	Fermions de spin 1/2 dans un état singulet	300
	3-a Différentes contributions à l'énergie	300
	3-b Energie totale	306
4	Bosons de spin nul	306
	4-a Choix de l'état variationnel	307
	4-b Différentes contributions à l'énergie	308
	4-c Energie totale	312

Dans le Chapitre XVII, nous avons introduit les états appariés de façon générale, sans spécifier de forme particulière pour l'hamiltonien. Pour utiliser les états appariés $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ dans le cadre d'une méthode variationnelle, c'est-à-dire pour minimiser la valeur moyenne de l'énergie d'un système de N particules identiques, il faut calculer la valeur moyenne de l'énergie dans ces états; c'est le but de ce complément. Nous commençons (§ 1) par examiner les conséquences du fait que ces états ne sont pas vecteurs propres de l'opérateur nombre total de particules \hat{N} . Ensuite (§ 2) nous précisons les notations et l'expression de l'hamiltonien \hat{H} . Nous traitons ensuite successivement le cas des fermions (§ 3) et celui des bosons (§ 4); ce second cas est légèrement plus compliqué car il demande, comme mentionné dans l'introduction, l'adjonction d'un état spécifique pour décrire le condensat.

1. Utilisation d'états qui ne sont pas états propres du nombre total de particules

Les états appariés $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ sont des superpositions cohérentes d'état contenant des nombres différents de particules. On peut alors se demander dans quelle mesure les valeurs moyennes calculées dans de tels états concernent effectivement un système physique où N est fixé à une valeur donnée. Nous avons déjà indiqué au § D du Chapitre XVII que ce doit effectivement être le cas lorsque la valeur moyenne du nombre de particules est grande, à condition toutefois que les opérateurs dont on recherche les valeurs moyennes conservent le nombre de particules (opérateurs qui commutent avec le nombre total de particules \hat{N} , comme c'est le cas de l'opérateur hamiltonien \hat{H}). Nous allons montrer ici de façon plus détaillée que, lorsque ces

conditions sont remplies, les valeurs moyennes sont insensibles aux cohérences du vecteur d'état entre valeurs différentes de N , et peuvent effectivement être obtenues à partir des états appariés.

1-a. Calcul des valeurs moyennes

L'état $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ défini en (B-5) au Chapitre XVII est une superposition d'états $|\Psi_P\rangle$ où le nombre de particules est exactement $N = 2P$:

$$|\Psi_{\text{app}}\rangle = \sum_{P=0}^{\infty} \frac{1}{P!} |\Psi_P\rangle \quad (1)$$

Comme les éléments de matrice de l'opérateur \hat{H} entre kets propres de \hat{N} de valeurs propres différentes sont nuls, nous avons :

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\text{app}} | \hat{H} | \Psi_{\text{app}} \rangle &= \sum_{P=0}^{\infty} \left[\frac{1}{P!} \right]^2 \langle \Psi_P | \hat{H} | \Psi_P \rangle \\ &= \sum_{P=0}^{\infty} \left[\frac{1}{P!} \right]^2 \langle \Psi_P | \Psi_P \rangle E_P \end{aligned} \quad (2)$$

où E_P est la valeur moyenne de l'énergie dans l'état $|\Psi_P\rangle$:

$$E_P = \frac{\langle \Psi_P | \hat{H} | \Psi_P \rangle}{\langle \Psi_P | \Psi_P \rangle} \quad (3)$$

Donc, si l'on introduit la distribution de poids $\mathcal{D}(P)$ par :

$$\mathcal{D}(P) = \left[\frac{1}{P!} \right]^2 \langle \Psi_P | \Psi_P \rangle \quad (4)$$

l'élément diagonal de \hat{H} dans $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ est donné par :

$$\langle \Psi_{\text{app}} | \hat{H} | \Psi_{\text{app}} \rangle = \sum_{P=0}^{\infty} \mathcal{D}(P) E_P \quad (5)$$

La valeur moyenne $\langle \hat{H} \rangle$ est ensuite obtenue en divisant cette expression par le carré de la norme $\langle \Psi_{\text{app}} | \Psi_{\text{app}} \rangle$.

De façon générale, l'élément diagonal dans $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ de tout opérateur \hat{A} qui commute avec \hat{N} est donné par une combinaison linéaire des valeurs moyennes de cet opérateur dans les états $|\Psi_P\rangle$ avec une distribution de poids $\mathcal{D}(P)$. C'est le cas par exemple de toute fonction $F(\hat{N})$ de l'opérateur \hat{N} :

$$\langle \Psi_{\text{app}} | F(\hat{N}) | \Psi_{\text{app}} \rangle = \sum_{P=0}^{\infty} \mathcal{D}(P) F(2P) \quad (6)$$

1-b. Une bonne approximation

Pour un système dont le nombre $N = 2P$ de particules est fixé, ce sont les valeurs propres E_P et les kets $|\Psi_P\rangle$ qui sont recherchés. La méthode la plus directe serait donc de varier séparément chaque ket $|\Psi_P\rangle$ pour optimiser E_P . Elle conduirait toutefois à des calculs compliqués ; il s'avère en pratique bien plus commode de faire varier $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ et d'optimiser l'énergie correspondante, car cela revient pratiquement au même lorsque le nombre de particules est grand.

Nous avons en effet vérifié au § C-2 du Chapitre XVII que les fluctuations du nombre de particules dans un état $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ sont très petites en valeur relative lorsque N est grand. Cela indique que la distribution $\mathcal{D}(P)$ est très piquée autour d'une certaine valeur P_0 de P , qui fixe la moitié de la valeur moyenne du nombre de particules. Or, si les énergies E_P varient peu sur la largeur de cette distribution, l'élément de matrice diagonal de l'hamiltonien (5) peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\text{app}} | \hat{H} | \Psi_{\text{app}} \rangle &\simeq E_{P_0} \sum_{P=0}^{\infty} \left[\frac{1}{P!} \right]^2 \langle \Psi_P | \Psi_P \rangle \\ &= E_{P_0} \langle \Psi_{\text{app}} | \Psi_{\text{app}} \rangle \end{aligned} \quad (7)$$

Rendre stationnaire cet élément de matrice diagonal (à norme constante de $|\Psi_{\text{app}}\rangle$) revient donc à rendre E_{P_0} stationnaire ; la valeur ainsi obtenue pour cet élément de matrice diagonal, divisée par le carré de la norme de $|\Psi_{\text{app}}\rangle$, fournit une bonne approximation de l'énergie recherchée E_{P_0} . De plus, une fois $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ ainsi optimisé, on peut le projeter dans les divers sous-espaces à nombre de particules fixé, afin d'obtenir des $|\Psi_P\rangle$ qui fournissent des états stationnaires à nombre fixé de particules. Dans les compléments qui suivent, nous allons donc utiliser les états appariés plutôt que les états à nombre de particules fixé $|\Psi_P\rangle$.

Remarque :

Dans les compléments suivants, plutôt que l'énergie moyenne, c'est la différence entre cette énergie moyenne et le nombre moyen de particules multiplié par le potentiel chimique μ que nous optimiserons. Comme les deux opérateurs \hat{H} et \hat{N} commutent avec le nombre total de particules, le raisonnement que nous venons de faire s'applique tout aussi bien à ce cas.

2. Hamiltonien

Nous considérons un système physique composé de fermions ou de bosons placés dans une boîte cubique de côté L .

2-a. Expression de l'opérateur

L'hamiltonien \hat{H} est le même que celui que nous avons déjà utilisé à plusieurs reprises, par exemple dans le Complément E_{XV} (mais ici nous supposons l'absence de potentiel extérieur) :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}_{\text{int}} \quad (8)$$

L'opérateur \widehat{H}_0 est la somme des opérateurs d'énergie cinétique individuelle $K_0(q)$ associés à chaque particule q :

$$\widehat{H}_0 = \sum_q K_0(q) = \sum_q \frac{\mathbf{P}^2(q)}{2m} \quad (9)$$

et \widehat{W}_{int} est la somme des énergies d'interaction entre les particules :

$$\widehat{W}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{q \neq q'=1}^N W_2(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) \quad (10)$$

où $W_2(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'})$ ne dépend que de la différence $\mathbf{R}_q - \mathbf{R}_{q'}$ (invariance par translation) et n'agit pas sur les spins.

Exprimons maintenant \widehat{H} en fonction d'opérateurs de création et d'annihilation, selon les formules établies au Chapitre XV. Pour cela, nous utilisons la base des états individuels $|u_{\mathbf{k},\nu}\rangle$, où \mathbf{k} repère l'impulsion $\hbar\mathbf{k}$ d'une onde plane vérifiant les conditions aux limites périodiques dans la boîte ; l'indice ν repère l'état de spin de la particule mais, si toutes sont dans le même état de spin, il peut être omis dans tout ce qui suit. Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} \widehat{H} = & \sum_{\mathbf{k},\nu} e_k a_{\mathbf{k},\nu}^\dagger a_{\mathbf{k},\nu} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\nu;\mathbf{k}',\nu';\mathbf{k}'',\nu'';\mathbf{k}''',\nu'''} \langle 1 : \mathbf{k}'', \nu'; 2 : \mathbf{k}''', \nu' | \widehat{W}_2(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) | 1 : \mathbf{k}, \nu; 2 : \mathbf{k}', \nu' \rangle \\ & \times a_{\mathbf{k}'',\nu'}^\dagger a_{\mathbf{k}''',\nu'}^\dagger a_{\mathbf{k}',\nu'} a_{\mathbf{k},\nu} \end{aligned} \quad (11)$$

avec :

$$e_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (12)$$

(le fait que le potentiel d'interaction n'agisse pas sur les spins nous a permis de remplacer l'indice de spin ν'' associé à \mathbf{k}'' par l'indice ν , ainsi que celui ν''' associé à \mathbf{k}''' par l'indice ν'). Les éléments de matrice de \widehat{W}_2 apparaissant dans (11) s'écrivent :

$$\int d^3 r_1 \int d^3 r_2 W_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \frac{1}{L^6} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'') \cdot \mathbf{r}_1} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}''') \cdot \mathbf{r}_2} \quad (13)$$

Effectuons un changement de variables $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ et $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. L'intégrale sur $d^3 R$ de l'exponentielle introduit un delta de Kronecker :

$$\frac{1}{L^3} \int d^3 R e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}'-\mathbf{k}''-\mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}} = \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{k}''+\mathbf{k}'''} \quad (14)$$

qui impose la condition de conservation de l'impulsion totale :

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{k}'' + \mathbf{k}''' \quad (15)$$

L'intégrale sur $d^3 r$ introduit la transformée de Fourier $V_{\mathbf{q}}$ du potentiel¹ :

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{1}{L^3} \int d^3 r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} W_2(\mathbf{r}) \quad (16)$$

1. Le facteur $1/L^3$ de (16) provient de la normalisation des ondes planes $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}/L^{3/2}$ dans un cube de côté L ; il assure que V est homogène à une énergie.

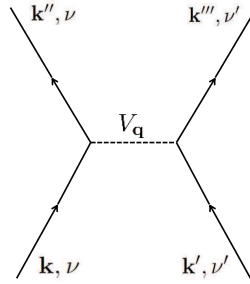


FIGURE 1 – Ce diagramme symbolise un processus d'interaction général au cours duquel, lors d'une interaction mutuelle, deux particules d'impulsions \mathbf{k} et \mathbf{k}' sont remplacées par des particules d'impulsions \mathbf{k}'' et \mathbf{k}''' . Les indices ν et ν' indiquent les spins, qui ne sont pas modifiés dans l'interaction. La ligne horizontale représente un transfert d'impulsion \mathbf{q} dont la valeur est donnée en (17) et (18).

avec :

$$\mathbf{q} = \frac{(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}) - (\mathbf{k}''' - \mathbf{k}')}{2} \quad (17)$$

soit, compte tenu de (15) :

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}'' - \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}''' \quad (18)$$

Le transfert \mathbf{q} est donc la variation d'impulsion de la particule 1, ou encore l'opposé de cette variation pour la particule 2. Comme $W_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ est symétrique par échange des variables \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 , les fonctions $W_2(\mathbf{r})$ et $V_{\mathbf{q}}$ sont paires et réelles.

L'élément de matrice du potentiel d'interaction est donc :

$$\langle 1 : \mathbf{k}'', \nu; 2 : \mathbf{k}''', \nu' | \widehat{W}_2(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) | 1 : \mathbf{k}, \nu; 2 : \mathbf{k}', \nu' \rangle = \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{k}', \mathbf{k}'' + \mathbf{k}'''} V_{\mathbf{q}} \quad (19)$$

qui est symbolisé sur la figure 1, où la ligne horizontale schématise le transfert d'impulsion \mathbf{q} opéré par l'interaction entre les particules entrantes et sortantes. Il s'ensuit que l'opérateur potentiel d'interaction s'écrit :

$$\widehat{W}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''} V_{\mathbf{q}} \sum_{\nu, \nu'} a_{\mathbf{k}'', \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}''', \nu'}^\dagger a_{\mathbf{k}', \nu'} a_{\mathbf{k}, \nu} \quad (20)$$

où la somme sur les \mathbf{k} ne porte en fait que sur trois vecteurs d'onde, puisque $\mathbf{k}''' = \mathbf{k} + \mathbf{k}' - \mathbf{k}''$.

Une approximation fréquemment utilisée est celle où la portée du potentiel d'interaction est très petite devant toutes les longueurs d'onde de de Broglie des particules mises en jeu (potentiel de contact). On peut alors négliger les variations avec \mathbf{k} de $\overline{W}_2(\mathbf{k})$, de sorte que tous les éléments de matrice du potentiel d'interaction sont égaux à une même constante V_0 (à condition qu'ils conservent l'impulsion totale ; sinon ils sont bien sûr nuls) :

$$V_0 = \frac{1}{L^3} \int d^3r W_2(\mathbf{r}) \quad (21)$$

2-b. Simplifications dues à l'appariement

En général, le calcul de la valeur moyenne de l'opérateur (11) est très compliqué, du fait de la multiplicité des termes d'interaction qui peuvent apparaître. Cependant, comme nous l'avons déjà vu au § D-1-a du Chapitre XVII, pour un état apparié un certain nombre de simplifications se produisent. La raison en est que, dans les diverses composantes d'un état apparié sur des états de Fock, les populations des états individuels appariés sont toujours égales. Pour obtenir une valeur moyenne non nulle dans un état apparié, il faut donc que la combinaison d'opérateurs de création et d'annihilation dans le terme d'interaction considéré respecte cette condition de parité.

Or l'opérateur d'interaction (20) est une somme de termes contenant deux opérateurs d'annihilation à droite et deux de création à gauche. Il n'existe donc que deux possibilités pour que l'équilibre des populations de toutes les paires soit conservé par application de ces quatre opérateurs : ou bien les deux opérateurs de création rétablissent à leurs valeurs initiales les populations des deux états dépeuplés par les annihilations (cas auquel aucune population ne varie) ; ou bien les deux opérateurs d'annihilation détruisent des particules dans une même paire d'états, et ceux de création produisent une autre paire (cas auquel la population de la première paire² diminue de 2, celle de la seconde augmente de 2). Les deux possibilités se combinent dans un cas particulier : celui où les opérateurs de création restaurent précisément la paire de particules détruite par les opérateurs d'annihilation. Nous sommes ainsi conduits aux cas dont la liste a été faite au § D-1-a du Chapitre XVII : cas **I** (termes de diffusion vers l'avant, direct et d'échange), cas **II** (termes d'annihilation-crédation de paires) et cas **III** (combinaison des précédents, qui apporte une contribution négligeable).

3. Fermions de spin 1/2 dans un état singulet

Calculons maintenant la valeur moyenne $\langle H \rangle$ de l'opérateur \hat{H} écrit en (11) dans l'état $|\Psi_{BCS}\rangle$ défini au § B-2-b du chapitre XVII. En ce qui concerne l'énergie d'interaction, nous allons voir que les termes associés au cas **I** ne font que redonner les contributions habituelles du champ moyen, déjà discutées dans les chapitres précédents. En revanche, les termes associés au cas **II** sont des conséquences directes de l'appariement, et sont donc totalement nouveaux ; ce sont eux qui jouent un rôle essentiel dans la théorie BCS. Enfin, le fait que les termes associés au cas **III** soient un cas particulier des précédents fait qu'ils jouent généralement un rôle négligeable.

3-a. Différentes contributions à l'énergie

Les différentes contributions à l'énergie sont évaluées successivement, en commençant par l'énergie cinétique.

α. Énergie cinétique

Le premier terme (énergie cinétique) est, comme pour le nombre de particules, la somme des contributions des couples d'états repérés par \mathbf{k} (ayant tous deux la

2. Au § C-2 du Chapitre XVII, nous avons défini l'opérateur population de la paire \hat{n}_{paire} comme la somme des opérateurs population des deux états individuels de la paire.

même énergie cinétique) :

$$\begin{aligned} \langle H_0 \rangle &= 2 \sum_{\mathbf{k}} e_k \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | \hat{n}_{(\text{paire } \mathbf{k})} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} e_k |v(\mathbf{k})|^2 \\ &= 2 \sum_{\mathbf{k}} e_k \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (22)$$

$\beta.$ *Energie d'interaction*

La moyenne de l'énergie potentielle d'interaction est la somme des moyennes des termes du second membre de (20), donc de termes qui se rangent dans l'une des trois possibilités **I**, **II** et **III** énoncées ci-dessus ; nous les prenons en compte l'une après l'autre.

– **Cas I (les opérateurs de création repeuplent les états dépeuplés par les opérateurs d'annihilation)**

Pour de tels termes, les nombres d'occupation de chaque état individuel restent inchangés lors du processus d'interaction ; en ce sens, ce sont des “termes diagonaux” (parfois appelés “termes de champ moyen”). Deux cas se présentent selon que, dans (20), l'indice de spin ν est égal ou différent de ν' ; nous examinons donc successivement ces deux possibilités.

(i) Si $\nu' = -\nu$, comme le potentiel d'interaction n'agit pas sur les spins, on peut suivre chaque particule à la trace par la direction de son spin ; tout se passe donc comme si les particules étaient discernables. Si les opérateurs de création repeuplent exactement les états individuels dépeuplés par les opérateurs d'annihilation, la seule possibilité est celle représentée sur la figure 2, qui correspond à une *diffusion vers l'avant*. Le transfert d'impulsion \mathbf{q} étant nul, le potentiel intervient par la constante V_0 . Nous obtenons alors la contribution suivante à l'énergie moyenne :

$$\frac{V_0}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq -\mathbf{k}', \nu} \langle \bar{\Psi}_{BCS} | (a_{\mathbf{k}, \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}', -\nu}^\dagger a_{\mathbf{k}', -\nu} a_{\mathbf{k}, \nu}) | \bar{\Psi}_{BCS} \rangle \quad (23)$$

(la condition $\mathbf{k} \neq -\mathbf{k}'$ provient de ce que les paires sont différentes, chaque paire étant repérée par la valeur de \mathbf{k} associée au spin $+$). Deux anticommutations permettent d'amener le dernier opérateur $a_{\mathbf{k}, \nu}$ juste après le premier $a_{\mathbf{k}, \nu}^\dagger$ (avec deux changements de signe qui se compensent). Si, de plus, nous effectuons la somme des contributions de $\nu = +$ et de $\nu = -$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{V_0}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq -\mathbf{k}'} \left[\langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | a_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}, \uparrow} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle \langle \bar{\varphi}_{-\mathbf{k}'} | a_{\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}', \downarrow} | \bar{\varphi}_{-\mathbf{k}'} \rangle \right. \\ \left. + \langle \bar{\varphi}_{-\mathbf{k}} | a_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}, \downarrow} | \bar{\varphi}_{-\mathbf{k}} \rangle \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}'} | a_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}', \uparrow} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}'} \rangle \right] \end{aligned} \quad (24)$$

Une interversion des deux indices muets de sommation \mathbf{k} et \mathbf{k}' montre que les deux termes dans le crochet apportent la même contribution. Nous prenons donc le double du premier terme qui, par un changement de signe de \mathbf{k}' , devient :

$$\begin{aligned} V_0 \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | a_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}, \uparrow} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}'} | a_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}', \downarrow} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}'} \rangle &= V_0 \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} |v(\mathbf{k})|^2 |v(\mathbf{k}')|^2 \\ &= V_0 \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}'} \end{aligned} \quad (25)$$

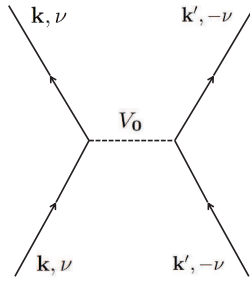


FIGURE 2 – Diagramme d'interaction entre particules de spins opposés n'appartenant pas à une même paire (diffusion vers l'avant). Ce diagramme contribue au champ moyen des particules.

Lorsque les particules sont réparties dans un grand nombre d'états individuels, la valeur de la somme dans cette expression est très peu changée si l'on ignore la contrainte $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$. Alors, si nous utilisons l'expression (C-19) du Chapitre XVII pour $\langle N \rangle$, nous pouvons écrire cette contribution sous la forme :

$$\frac{V_0}{4} \langle N \rangle^2 \quad (26)$$

D'après la relation (21) la constante V_0 est proportionnelle à l'inverse du volume L^3 . Ce terme s'interprète comme un terme de champ moyen, où $\langle N \rangle / 2$ particules de spin + interagissent avec $\langle N \rangle / 2$ particules de spin - ; une particule de direction de spin donnée ressent le champ moyen exercé par toutes celles de spin opposé, de densité numérique $\langle N \rangle / 2L^3$.

(ii) Si $\nu' = \nu$, il n'est plus possible de distinguer les deux particules à la direction de leurs spins, de sorte que les effets d'indiscernabilité jouent tout leur rôle. Deux cas se présentent alors pour ces "termes diagonaux" : soit $\mathbf{k}'' = \mathbf{k}$ et $\mathbf{k}''' = \mathbf{k}'$, ce qui donne lieu à un *terme direct* ; soit $\mathbf{k}''' = \mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'' = \mathbf{k}'$, ce qui donne lieu à un *terme d'échange*. Dans les deux cas, les états individuels peuplés dans le bra et le ket sont les mêmes, de sorte qu'il s'agit de "processus diagonaux" que l'on peut qualifier de "termes de champ moyen".

Pour le terme direct, aucune particule ne change d'impulsion, ce qui correspond à nouveau à une "diffusion vers l'avant" (partie gauche de la figure 3), de sorte que le potentiel intervient encore par la constante V_0 écrite en (21). La valeur moyenne de ce terme direct est :

$$\frac{V_0}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}', \nu} \langle \bar{\Psi}_{BCS} | a_{\mathbf{k}, \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}', \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}', \nu} a_{\mathbf{k}, \nu} | \bar{\Psi}_{BCS} \rangle \quad (27)$$

Ici aussi, comme $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ (sinon l'on obtiendrait le carré d'un opérateur d'annihilation, qui est nul), deux anticommutations nous permettent d'amener l'opérateur $a_{\mathbf{k}, \nu}$ en seconde position, et nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{V_0}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}', \nu} \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | a_{\mathbf{k}, \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}, \nu} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}'} | a_{\mathbf{k}', \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}', \nu} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}'} \rangle &= V_0 \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{k}'}|^2 \\ &= V_0 \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}'} \quad (28) \end{aligned}$$

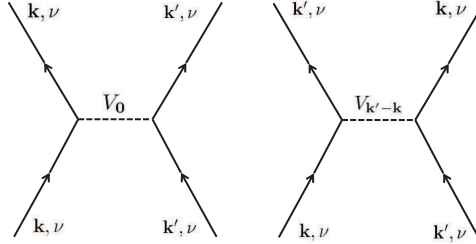


FIGURE 3 – Interaction entre particules de même spin ; la partie gauche schématise le terme direct (diffusion vers l’avant), la partie droite le terme d’échange. Ces deux diagrammes ajoutent leur contribution à celle du diagramme de la figure 2 pour engendrer le champ moyen des particules.

(les deux valeurs de ν apportent la même contribution, ce qui explique la disparition du facteur $1/2$ au second membre). Pour le terme d’échange, on a $\mathbf{k}''' = \mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'' = \mathbf{k}'$ (partie droite de la Figure 3) ; dans un tel échange d’impulsion, le transfert \mathbf{q} n’est plus nul mais égal à :

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} \quad (29)$$

de sorte que le potentiel intervient maintenant par $V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}$ obtenu en portant $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ dans (16). D’autre part, lorsque $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$:

$$a_{\mathbf{k}, \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}', \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}, \nu} a_{\mathbf{k}', \nu} = -a_{\mathbf{k}, \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}', \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}', \nu} a_{\mathbf{k}, \nu} \quad (30)$$

A part ce changement de signe, le calcul est le même que celui du terme direct. La somme des deux contributions directe + échange conduit donc à :

$$\sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} [V_0 - V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}] |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{k}'}|^2 = \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} [V_0 - V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}] \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}'} \quad (31)$$

Dans l’approximation du potentiel de courte portée où $V_{\mathbf{k}'' - \mathbf{k}} = V_0$, cette somme est nulle : le principe d’exclusion de Pauli empêche les particules de même composante du spin d’interagir par un potentiel de contact.

– Cas II (particules annihilées dans une paire d’états, puis restaurées dans une autre paire)

Du fait de la nature des opérateurs de création et d’annihilation qu’il contient, ce processus peut être nommé “annihilation-création de paires”. C’est lui qui joue le rôle essentiel dans l’appariement BCS, comme nous le verrons au Complément C_{XVII} ; le terme de l’hamiltonien correspondant est donc souvent appelé “terme d’appariement” (en anglais “*pairing term*”).

On a alors d’une part $\mathbf{k}'' = -\mathbf{k}$ et $\nu' = -\nu$ et d’autre part $\mathbf{k}''' = -\mathbf{k}''$, de sorte que $\mathbf{q} = \mathbf{k}'' - \mathbf{k}$ selon la définition (17) de \mathbf{q} ; le diagramme correspondant est celui

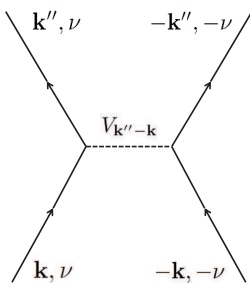


FIGURE 4 – Processus d'interaction entre deux particules d'une même paire qui, dans leur état final, aboutissent dans une autre paire. En termes d'opérateurs de création et d'annihilation, il s'agit d'un processus d'annihilation-création de paires (deux particules d'une même paire sont annihilées tandis que deux particules sont créées dans une autre paire). Contrairement aux termes introduits par les autres processus d'interaction, celui-ci introduit une contribution à l'énergie qui dépend de l'appariement ; en anglais, on appelle parfois "pairing term" le terme correspondant. C'est ce terme qui est à l'origine du gain d'énergie de la théorie BCS.

de la figure 4. Nous montrons ci-dessous que sa contribution à l'énergie s'écrit :

$$\sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}'' - \mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}''} \cos \theta_{\mathbf{k}''} e^{2i(\zeta_{\mathbf{k}} - \zeta_{\mathbf{k}''})} \quad (32)$$

Ce terme est nouveau, en ce sens qu'il n'est pas un terme de champ moyen comme les précédents, mais que son existence provient de l'appariement. Nous verrons au Complément C_{XVII} que la contribution qu'il introduit dans l'énergie moyenne est celle qui joue le rôle essentiel dans la théorie BCS.

Démonstration :

Si $\nu = +$, il apparaît ainsi une contribution contenant un produit de valeurs moyennes "anormales" :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}'' - \mathbf{k}} \langle \bar{\Psi}_{BCS} | a_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}, \downarrow} a_{\mathbf{k}, \uparrow} | \bar{\Psi}_{BCS} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}'' - \mathbf{k}} \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}''} | a_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}''} \rangle \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | a_{-\mathbf{k}, \downarrow} a_{\mathbf{k}, \uparrow} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle \end{aligned} \quad (33)$$

soit, selon (C-42) et (C-44) du Chapitre XVII :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}'' - \mathbf{k}} u_{\mathbf{k}''} v_{\mathbf{k}''}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}'' - \mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}''} \cos \theta_{\mathbf{k}''} e^{2i(\zeta_{\mathbf{k}} - \zeta_{\mathbf{k}''})} \end{aligned} \quad (34)$$

Si $\nu = -$, ce sont les kets $|\bar{\varphi}_{-\mathbf{k}}\rangle$ et $|\bar{\varphi}_{-\mathbf{k}''}\rangle$ qui interviennent, et l'on obtient un autre produit de valeurs moyennes anormales où il faut utiliser (C-43) et (C-45) du

Chapitre XVII (ainsi que le fait que les fonction de \mathbf{k} sont paires, comme indiqué dans ce chapitre) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}'' - \mathbf{k}} \langle \bar{\Psi}_{BCS} | a_{\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}, \uparrow} a_{\mathbf{k}, \downarrow} | \bar{\Psi}_{BCS} \rangle \\ = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}'' - \mathbf{k}} v_{-\mathbf{k}}^* u_{-\mathbf{k}} v_{-\mathbf{k}} u_{-\mathbf{k}}^* \end{aligned} \quad (35)$$

Cette expression est égale à la précédente puisqu'elle ne diffère que par le signe des indices muets de sommation \mathbf{k} et \mathbf{k}'' (rappelons que $V_{\mathbf{q}}$ est paire). Il nous suffit donc de supprimer le facteur 1/2 de (34) pour obtenir (32).

– Cas III (particules annihilées dans une paire d'états, puis restaurées dans la même paire)

On a alors à nouveau $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ et $\nu' = -\nu$, mais de plus $\mathbf{k}'' = \mathbf{k}$ (et donc nécessairement $\mathbf{k}''' = \mathbf{k}'$), comme représenté sur la figure 5 ; il s'agit à nouveau d'un cas de diffusion vers l'avant.

Vérifions que ce terme apporte une contribution négligeable. Sa contribution à l'énergie est :

$$\frac{V_0}{2} \sum_{\mathbf{k}, \nu} \langle \bar{\Psi}_{BCS} | a_{\mathbf{k}, \nu}^\dagger a_{-\mathbf{k}, -\nu}^\dagger a_{-\mathbf{k}, -\nu} a_{\mathbf{k}, \nu} | \bar{\Psi}_{BCS} \rangle \quad (36)$$

Si $\nu = +$, on obtient (après deux anticommutations d'opérateurs) :

$$\frac{V_0}{2} \sum_{\mathbf{k}} \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | (a_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}, \uparrow}) (a_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}, \downarrow}) | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{V_0}{2} \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 \quad (37)$$

et si $\nu = -$:

$$\frac{V_0}{2} \sum_{\mathbf{k}} \langle \bar{\varphi}_{-\mathbf{k}} | (a_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}, \downarrow}) (a_{-\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}, \uparrow}) | \bar{\varphi}_{-\mathbf{k}} \rangle = \frac{V_0}{2} \sum_{\mathbf{k}} |v_{-\mathbf{k}}|^2 \quad (38)$$

Ce terme est égal au précédent, puisqu'il n'en diffère que par le signe de l'indice muet de sommation \mathbf{k} . On obtient donc au total, compte tenu de l'expression (C-19) du Chapitre XVII de $\langle N \rangle$:

$$V_0 \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{V_0}{2} \langle N \rangle \quad (39)$$

Cette contribution s'interprète comme l'énergie moyenne d'attraction au sein de $\langle N \rangle / 2$ paires. Lorsque le nombre moyen de particules est élevé, nous pouvons négliger (39) devant (26). Les effets d'appariement que nous allons discuter ne sont donc pas interprétables comme simplement dûs à l'attraction au sein de $N/2$ paires.

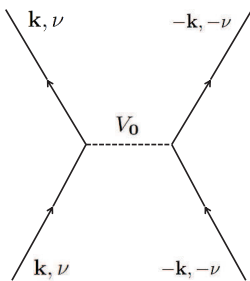


FIGURE 5 – Processus d'interaction au cours duquel deux particules d'une même paire sont diffusées vers l'avant.

3-b. Énergie totale

Pour finir, ajoutant les termes (22), (31), (26) et le double de (34), nous obtenons l'énergie moyenne³ :

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} + \frac{V_0}{4} \langle N \rangle^2 + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} [V_0 - V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}] \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}'} \\ + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}'' - \mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}''} \cos \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}''} e^{2i(\zeta_{\mathbf{k}} - \zeta_{\mathbf{k}''})} \quad (40) \end{aligned}$$

Le premier terme du second membre est celui d'énergie cinétique, le deuxième celui de champ moyen pour les particules de spins opposés, le troisième le terme analogue pour les particules de même spin (qui est nul pour un potentiel de courte portée) ; ces trois termes sont déjà présents en théorie de Hartree-Fock. En revanche, le quatrième terme sur la seconde ligne est nouveau : c'est celui d'annihilation-création de paires (terme d'appariement) dont la valeur moyenne n'est non nulle que si l'état est apparié. C'est le seul qui dépende des phases $\zeta_{\mathbf{k}}$, propriété qui joue un rôle essentiel dans la théorie BCS (Complément C_{XVII}).

4. Bosons de spin nul

Pour des bosons, nous devons tenir compte du phénomène de condensation de Bose-Einstein (Compléments B_{XV}, C_{XV} et F_{XV}) : dans l'état fondamental, une fraction importante des particules peut occuper un seul état quantique, l'état d'impulsion nulle $\mathbf{k} = 0$. Or ce n'est pas le cas avec un état apparié ; il nous faut donc choisir un état variationnel qui permette une telle condensation.

Nous supposons les interactions répulsives, afin d'éviter les instabilités qui se produisent pour un système de bosons attractifs (Complément H_{XV}, § 4-b).

3. Les sommes sur \mathbf{k} ne sont soumises ici à aucune restriction, contrairement au produit tensoriel apparaissant dans la relation (B-8) du Chapitre XVII, où la somme est limitée à un demi-espace afin d'éviter une redondance.

4-a. Choix de l'état variationnel

Au Complément C_{XV}, l'approximation de Gross-Pitaevskii a été utilisée pour traiter la condensation de Bose-Einstein de la façon la plus simple possible : on suppose que le système des N bosons est à un instant donné dans un état produit d'états individuels tous identiques. On prend généralement l'état d'impulsion $\mathbf{k} = 0$ nulle, de sorte que l'état s'écrit :

$$|\Phi\rangle = \left[a_0^\dagger \right]^N |0\rangle \quad (41)$$

(a_0^\dagger est l'opérateur de création dans l'état individuel $\mathbf{k} = 0$). Mais, si un tel état est acceptable pour l'état fondamental d'un gaz parfait, pour un gaz de particules en interaction ce ne peut être qu'une approximation : il est certes vecteur propre de l'énergie cinétique, mais pas de l'opérateur associé à l'énergie d'interaction. L'effet du potentiel d'interaction est de coupler cet état à tous les états où deux particules sont transférées de l'état individuel $\mathbf{k} = 0$ vers deux états individuels d'impulsions opposées (à cause de la conservation de l'impulsion) quelconques \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$, comme par exemple l'état :

$$|\Phi'\rangle = \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger \right] \left[a_{-\mathbf{k}}^\dagger \right] \left[a_0^\dagger \right]^{N-2} |0\rangle \quad (42)$$

où deux états d'une paire sont peuplés. Ceci suggère d'utiliser un état $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ comme ket variationnel⁴ pour décrire les composantes du vecteur d'état du système associées à tous les états individuels $\mathbf{k} \neq 0$. Mais il faut également inclure les composantes correspondant à l'état individuel $\mathbf{k} = 0$; celles-ci seront décrites⁵ par un "état cohérent" (Complément G_V).

Nous choisissons donc le vecteur d'état variationnel sous la forme :

$$|\Phi_B\rangle = |\varphi_0\rangle \otimes |\Psi_{\text{app}}\rangle = |\varphi_0\rangle \otimes \prod_{\mathbf{k} \in D} |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle \quad (43)$$

(la notation B fait référence au nom de Bogolubov). Dans cette expression, $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ est l'état apparié pour des particules sans spin (B-8) du Chapitre XVII, produit tensoriel des états normés $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ définis en (B-9) et (C-13). Le domaine D du produit tensoriel dans (43) désigne un demi-domaine de l'espace des \mathbf{k} afin d'éviter (comme nous l'avons vu plus haut) une double apparition de chaque état $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$; l'origine $\mathbf{k} = 0$ est exclue de D . Ce domaine peut éventuellement être limité par une valeur maximale de \mathbf{k} .

4. Le potentiel d'interaction couple également un état du type (42) à de nombreux états de la forme $\left[a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \right] \left[a_{-\mathbf{q}}^\dagger \right] \left[a_{-\mathbf{k}}^\dagger \right] \left[a_0^\dagger \right]^{N-3} |0\rangle$, où \mathbf{q} prend une valeur quelconque. Une théorie exacte demanderait la prise en compte de ces états "non appariés", mais rendrait le calcul compliqué. C'est pourquoi nous recourons à une méthode variationnelle, dans le cadre d'une approximation où les états $\mathbf{k} \neq 0$ ne sont accessibles que par paires (si N_0 est le nombre moyen de particules dans le niveau individuel $\mathbf{k} = 0$, nous supposons $N - N_0 \ll N$).

5. Cet état individuel doit en effet être traité à part, car l'application de la formule générale (B-9) du Chapitre XVII utilisée quand $\mathbf{k} \neq 0$ pour obtenir $|\varphi_{\mathbf{k}=0}\rangle$ conduirait à l'exponentielle du carré de l'opérateur $a_{\mathbf{k}=0}^\dagger$, ce qui impliquerait de fortes fluctuations du nombre de particules dans l'état $\mathbf{k} = 0$ (particules condensées). Or elles entraîneraient nécessairement des fluctuations importantes du nombre total de particules ainsi que de l'énergie moyenne de répulsion alors que, comme nous l'avons vu au § 3-b- β du Complément G_{XV}, elles sont rendues impossibles précisément par cette répulsion.

Pour $|\varphi_0\rangle$, c'est l'état cohérent dont l'expression peut par exemple être trouvée dans le Complément G_V, dont la relation (65) s'écrit :

$$|\varphi_0\rangle = e^{-N_0/2} e^{\alpha_0 a_0^\dagger} |n_0 = 0\rangle \quad (44)$$

Cet état dépend d'un paramètre complexe α_0 , que nous caractérisons par son module $\sqrt{N_0}$ et sa phase ζ_0 :

$$\alpha_0 = \sqrt{N_0} e^{i\zeta_0} \quad (45)$$

C'est un vecteur propre normé de l'opérateur a_0 de valeur propre α_0 :

$$a_0 |\varphi_0\rangle = \alpha_0 |\varphi_0\rangle \quad (46)$$

Le nombre moyen de particules dans l'état $\mathbf{k} = 0$ est donc :

$$\langle \varphi_0 | a_0^\dagger a_0 | \varphi_0 \rangle = \alpha_0^* \alpha_0 \langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = N_0 \quad (47)$$

Nous avons également vu au Complément G_V que la largeur de la distribution correspondante est $\sqrt{N_0}$, donc négligeable devant N_0 (nous supposons que ce nombre est grand).

Les variables variationnelles contenues dans le ket d'essai (43) sont donc l'ensemble des $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$, ainsi que N_0 et ζ_0 .

4-b. Différentes contributions à l'énergie

Calculons maintenant la valeur moyenne de l'énergie dans l'état variationnel $|\Phi_B\rangle$ écrit en (43) de l'opérateur hamiltonien écrit en (11).

α. Énergie cinétique

Le terme d'énergie cinétique est la somme des contributions des différents états individuels \mathbf{k} , sans contribution de l'état $\mathbf{k} = 0$ (puisque $e_{k=0} = 0$). Chacun des termes dans la somme contient l'opérateur $\hat{n}_{\mathbf{k}}$, dont la valeur moyenne dans l'état factorisé (43) sur les \mathbf{k} est donnée par la valeur moyenne $\langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | \hat{n}_{\mathbf{k}} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle$ dans l'état $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$; la relation (C-33) du Chapitre XVII indique que cette valeur moyenne est égale à $\text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}}$, de sorte que nous obtenons pour la valeur moyenne E_c de l'énergie cinétique dans l'état $|\Phi_B\rangle$ l'expression :

$$E_c = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e_k \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | \hat{n}_{\mathbf{k}} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e_k \text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} \quad (48)$$

avec :

$$e_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (49)$$

où m est la masse des particules.

β. Énergie d'interaction

La valeur moyenne de l'énergie potentielle d'interaction est une somme sur quatre indices $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''$ contenant les éléments de matrice du potentiel écrits en (19). Contrairement à ce qui se passe pour l'énergie cinétique, ces éléments n'ont aucune raison particulière de s'annuler si l'un (ou plusieurs) des indices est nul. Nous allons donc calculer les différentes contributions en les rangeant par ordre décroissant de nombre d'indices nuls.

Une simplification notable dans le calcul est apportée par le choix du vecteur d'essai, où se trouve en facteur l'état cohérent $|\varphi_0\rangle$. Chaque fois que l'un des quatre indices dans le terme d'énergie potentielle est nul, on peut remplacer l'opérateur d'annihilation correspondant par le nombre complexe α_0 . En effet, le ket d'essai $|\Phi_B\rangle$ est vecteur propre de l'opérateur a_0 de valeur propre α_0 – cf. relation (46). De même, chaque fois que l'un des deux indices \mathbf{k} ou \mathbf{k}' est nul, les opérateurs de création placés à gauche du produit, et qui agissent donc sur le bra $\langle\Phi_B|$, peuvent être remplacés par α_0^* , puisque la conjuguée hermitique de la relation (46) s'écrit :

$$\langle\varphi_0| a_0^\dagger = \alpha_0^* \langle\varphi_0| \tag{50}$$

Ces deux opérateurs sont donc simplement remplacés par des nombres. Examinons alors les différents cas possibles.

(i) Si les quatre indices $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''$ sont nuls, la contribution correspondante fait intervenir le potentiel d'interaction via la constante V_0 (terme de diffusion vers l'avant), définie en (16) comme l'intégrale du potentiel d'interaction $W_2(\mathbf{r})$; elle s'écrit :

$$\left\langle \widehat{W}_{\text{avant}} \right\rangle_{0,0} = \frac{V_0}{2} \langle\varphi_0| a_0^\dagger a_0^\dagger a_0 a_0 |\varphi_0\rangle = V_0 \frac{(N_0)^2}{2} \tag{51}$$

Le terme correspondant est symbolisé sur la Figure 6.

Il n'existe pas de contribution de termes où trois (et trois seulement) des indices $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''$ seraient nuls : la conservation de l'impulsion totale entraîne que le quatrième serait nécessairement nul.

(ii) Si parmi les quatre indices $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''$ deux sont nuls, l'un concernant un opérateur d'annihilation, l'autre un opérateur de création, la conservation de l'impulsion impose que les deux autres opérateurs soient $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ et $a_{\mathbf{k}}$, avec le même indice \mathbf{k} . Il peut alors apparaître, soit un terme direct, soit un terme d'échange.

- les termes directs contiennent la valeur moyenne, soit du produit $a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0^\dagger a_0 a_{\mathbf{k}}$, soit de $a_0^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} a_0$; il s'agit encore d'un processus de diffusion vers l'avant où le potentiel intervient par la constante V_0 . Les deux valeurs moyennes se factorisent en deux termes $\langle\varphi_0| a_0^\dagger a_0 |\varphi_0\rangle = |\alpha_0|^2$ et $\langle\overline{\varphi}_{\mathbf{k}}| \widehat{n}_{\mathbf{k}} |\overline{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = \text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}}$; elles sont donc égales. La contribution correspondante est ainsi :

$$\left\langle \widehat{W}_{\text{direct}} \right\rangle_{0,e} = V_0 N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} \tag{52}$$

où l'indice e symbolise l'ensemble des états "excités", c'est-à-dire ceux d'impulsion $\hbar\mathbf{k} \neq 0$ dont l'énergie cinétique est non nulle. Introduisons alors le nombre total moyen de particules N_e dans des états excités :

$$N_e = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right\rangle = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} \tag{53}$$

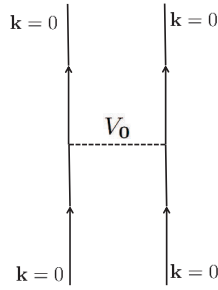


FIGURE 6 – Diagramme symbolisant l’interaction entre deux particules dans l’état individuel $\mathbf{k} = 0$ qui restent dans cet état individuel après interaction (terme de diffusion vers l’avant donnant lieu au champ moyen interne au condensat).

Nous pouvons alors écrire :

$$\langle \widehat{W}_{\text{direct}} \rangle_{0,e} = V_0 N_0 N_e \quad (54)$$

Ce terme s’interprète simplement comme traduisant l’interaction entre N_0 particules dans l’état condensé $\mathbf{k} = 0$ et N_e particules dans les autres états individuels.

- les termes d’échange contiennent $a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0^\dagger a_{\mathbf{k}} a_0$ et $a_0^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0 a_{\mathbf{k}}$. Il s’agit alors d’un processus de transfert d’impulsion, faisant intervenir le potentiel via la constante $V_{\mathbf{k}}$ obtenue en portant $\mathbf{q} = \mathbf{k}$ dans (16). Sinon, le calcul est le même que pour les termes directs : les deux valeurs moyennes se factorisent, et la contribution correspondante s’écrit :

$$\langle \widehat{W}_{\text{ex}} \rangle_{0,e} = N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} \text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} \quad (55)$$

Les deux termes (54) et (55) correspondent à des contributions du champ moyen associé à l’interaction entre particules $\mathbf{k} = 0$ et particules $\mathbf{k} \neq 0$, compte tenu de l’indiscernabilité des particules qui introduit le terme d’échange.

(iii) Si le produit d’opérateurs contient deux fois l’opérateur d’annihilation dans l’état $\mathbf{k} = 0$, la conservation de l’impulsion impose qu’il soit du type $a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_0 a_0$. Il s’agit alors d’un processus où deux particules dans l’état $\mathbf{k} = 0$ sont remplacées par une paire $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$, donc de la création d’une paire à partir du condensat, comme représenté sur la partie gauche de la Figure 7 ; le potentiel intervient à nouveau par la constante $V_{\mathbf{k}}$. Les deux opérateurs d’annihilation introduisent un facteur $[\alpha_0]^2 = N_0 e^{2i\zeta_0}$ et les deux autres opérateurs une “valeur moyenne anormale” dans un état $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$, déjà calculée en (C-51) au Chapitre XVII. Le résultat est donc :

$$-\frac{N_0}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} \text{sh} \theta_{\mathbf{k}} \text{ch} \theta_{\mathbf{k}} e^{2i(\zeta_0 - \zeta_{\mathbf{k}})} \quad (56)$$

Si le produit d’opérateurs contient deux fois l’opérateur de création dans l’état $\mathbf{k} = 0$, il s’agit nécessairement d’un produit du type $a_0^\dagger a_0^\dagger a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}$, qui correspond à

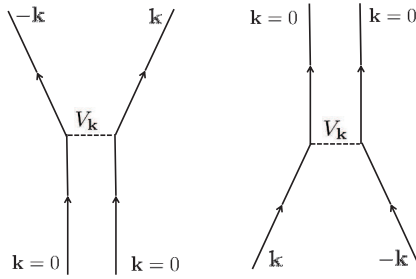


FIGURE 7 – Le diagramme de la partie gauche représente un processus au cours duquel deux particules dans l'état individuel $\mathbf{k} = 0$ interagissent et aboutissent dans des états d'impulsions opposées. Le diagramme de la partie droite représente le processus inverse, où deux particules d'impulsions opposées entrent en collision et aboutissent dans l'état individuel $\mathbf{k} = 0$ (c'est-à-dire dans le condensat). Contrairement aux termes de champ moyen entre particules, les termes correspondant à ces diagrammes sont introduits par le processus d'appariement ; ce sont eux qui jouent un rôle central dans la théorie de Bogolubov (Complément E_{XVII}).

l'annihilation d'une paire dont les deux particules sont transférées dans l'état $\mathbf{k} = 0$ (partie droite de la Figure 7). Ce produit est l'hermitique conjugué du précédent, de sorte que sa valeur moyenne en est la complexe conjuguée. La somme des deux termes conduit alors à la contribution des processus de création et d'annihilation de paires à partir du condensat :

$$-N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} \operatorname{sh} \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{ch} \theta_{\mathbf{k}} \cos 2(\zeta_0 - \zeta_{\mathbf{k}}) \quad (57)$$

Ces termes sont introduits par l'appariement entre les particules, contrairement aux termes précédents qui découlent du champ moyen. Nous verrons au Complément E_{XVII} le rôle essentiel qu'ils jouent dans la condensation de Bose-Einstein d'un ensemble de bosons.

(iv) Il existe des éléments de matrice du potentiel d'interaction faisant intervenir une seule particule dans l'état individuel $\mathbf{k} = 0$ et trois autres particules dans des états $\mathbf{k} \neq 0$. Cependant, les termes correspondants ont une valeur moyenne nulle dans l'état $|\Phi_B\rangle$ à cause de la structure de sa composante $|\Psi_{\text{app}}\rangle$, où les nombres d'occupation dans les deux états appariés doivent toujours varier conjointement.

(v) Enfin, reste à calculer la contribution des termes où aucun vecteur d'onde n'est nul. Le calcul est alors semblable à celui du § 3, et nous distinguons également trois cas :

– **Cas I**

Termes concernant les interactions où les particules sont créées dans les états où elles ont été détruites : terme direct en $a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}$ et terme d'échange en $a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}$. Le calcul est le même qu'au § 3, à ceci près qu'aucun signe moins ne s'introduit dans

le terme d'échange. Le résultat (31) devient donc, pour des bosons⁶ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} [V_0 + V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}] |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{k}'}|^2 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} [V_0 + V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}] \operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}'} \\ &\simeq \frac{V_0}{2} (N_e)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} \operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}'} \end{aligned} \quad (58)$$

Le premier terme est le terme direct qui, lorsque $N_e \gg 1$, s'interprète comme l'effet du champ moyen d'interaction entre les $N_e(N_e - 1)/2$ paires différentes de particules (lorsque $N_e \gg 1$) ; il est corrigé par un second terme d'échange, qui traduit l'augmentation d'interaction entre les particules due à l'effet de groupement de bosons.

– Cas II

Le terme “annihilation-création de paires” en $a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{-\mathbf{k}'}$ qui donne ici, compte tenu de (C-51) et (C-52) du Chapitre XVII :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}'' - \mathbf{k}} \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}''} | a_{\mathbf{k}''}^\dagger a_{-\mathbf{k}''}^\dagger | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}''} \rangle \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle \\ = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}'' - \mathbf{k}} \operatorname{sh} \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{ch} \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{sh} \theta_{\mathbf{k}''} \operatorname{ch} \theta_{\mathbf{k}''} e^{2i(\zeta_{\mathbf{k}} - \zeta_{\mathbf{k}''})} \end{aligned} \quad (59)$$

– Cas III

Enfin le cas où une seule paire est concernée conduit, comme dans le cas des fermions, à un terme proportionnel à $V_0 \langle N \rangle$, négligeable devant le terme en $V_0 \langle N \rangle^2$ de (58) lorsque le nombre moyen de particules est grand. Nous n'en tiendrons donc pas compte.

4-c. Énergie totale

Si nous regroupons les termes en V_0 de (51), (54) et de (58), nous obtenons un terme de champ moyen total :

$$\left\langle \widehat{W}_{\text{champ moyen}} \right\rangle = \frac{V_0}{2} (N_0 + N_e)^2 \quad (60)$$

Physiquement, il est naturel que ce terme soit proportionnel au carré du nombre total de particules divisé par 2, c'est-à-dire au nombre de façons d'associer par paires N particules (lorsque $N \gg 1$). Si nous incluons maintenant (55), (57) et (59), nous

6. Contrairement au cas des fermions, la contribution des termes $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ n'est pas nulle, mais fait intervenir la valeur moyenne de l'opérateur $\widehat{n}_{\mathbf{k}}(\widehat{n}_{\mathbf{k}} - 1)$ dans l'état $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$, cf. § C-2-b du Chapitre XVII. Cependant, pour un grand système, le nombre d'états individuels \mathbf{k} est très élevé, et cette contribution est totalement négligeable devant (58). C'est pourquoi nous n'en avons pas tenu compte.

Comme pour les fermions, les sommes sur \mathbf{k} ne sont soumises ici à aucune restriction (pas de limitation à un demi-espace réciproque).

obtenons l'énergie totale sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \langle \widehat{H} \rangle_B &= \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e_k \operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} + \frac{V_0}{2} (N_0 + N_e)^2 \\
 &+ N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} [\operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} - \operatorname{sh} \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{ch} \theta_{\mathbf{k}} \cos 2(\zeta_0 - \zeta_{\mathbf{k}})] \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \neq 0} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} [\operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}'} + \operatorname{sh} \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{sh} \theta_{\mathbf{k}'} \operatorname{ch} \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{ch} \theta_{\mathbf{k}'} \cos 2(\zeta_{\mathbf{k}} - \zeta_{\mathbf{k}'})]
 \end{aligned} \tag{61}$$

La somme de la seconde ligne traduit l'effet des échanges d'impulsion entre particules $\mathbf{k} \neq 0$ avec le condensat $\mathbf{k} = 0$, ainsi que le terme introduit par les processus d'annihilation-création de paires à partir du condensat (ce terme dépend des phases relatives $\zeta_0 - \zeta_{\mathbf{k}}$ et, comme nous l'avons vu, provient de l'appariement des particules). Les termes de la troisième ligne contenant une double somme sur \mathbf{k} et \mathbf{k}' correspondent à l'effet des interactions entre particules dans des états $\mathbf{k} \neq 0$; comme le nombre d'états individuels est très grand, nous avons ignoré la contrainte $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ de la relation (59), qui a un effet négligeable; de plus, nous avons noté dans le Chapitre XVII que l'exponentielle imaginaire pouvait être remplacée par un cosinus.

En conclusion de ce complément, les états appariés se prêtent bien au calcul de l'énergie moyenne d'un ensemble de particules en interaction. Dans les compléments qui suivent, nous allons appliquer ces résultats successivement à des fermions et des bosons.

Complément C_{XVII}

Appariement de fermions, théorie BCS

1	Optimisation de l'énergie	317
1-a	Fonction à optimiser	318
1-b	Annulation de la variation totale	320
1-c	Potentiel de courte portée, étude du gap	323
1-c- α	Condition d'autocohérence et divergences . . .	324
1-c- β	Calcul du gap	324
2	Fonctions de distribution, corrélations	326
2-a	Distribution à une particule	326
2-a- α	Espace des impulsions	326
2-a- β	Espace des positions	327
2-b	Distribution à deux particules, fonction d'onde interne des paires	328
2-b- α	Espace des impulsions, pic dans la distribution	328
2-b- β	Espace des positions, corrélations décrites par la fonction d'onde de paires	330
2-c	Propriétés de la fonction d'onde de paires, longueur de cohérence	336
2-c- α	Allure de la fonction d'onde de paires	336
2-c- β	Norme de la fonction d'onde de paires	337
2-c- γ	Lien avec l'énergie d'interaction	339
2-c- δ	Ordre non diagonal	339
3	Discussion physique	341
3-a	Modification de la surface de Fermi et blocage de phase	341
3-a- α	Compromis entre énergies cinétique et potentielle	342
3-a- β	Blocage de la phase et effets coopératifs	343
3-b	Gain d'énergie	344
3-c	Caractère non perturbatif de la théorie BCS	346
4	Etats excités	346
4-a	Transformation de Bogolubov-Valatin	346
4-b	Paires brisées et paires excitées	347
4-c	Stationnarité des énergies	348
4-c- α	Paire brisée	348
4-c- β	Paire excitée	349
4-d	Energies d'excitation	349
4-d- α	Paire brisée	349
4-d- β	Paire excitée	350
4-d- γ	Spectre des excitations élémentaires	351

Nous allons présenter dans ce complément le mécanisme BCS d'appariement de fermions dont les interactions sont attractives. Les trois lettres BCS désignent les noms de J. Bardeen, L.N. Cooper et J.R. Schrieffer qui ont proposé en 1957 [9] la théorie d'un phénomène physique auparavant incompris, mais observé dès 1911 par H. Kamerlingh Onnes à Leyde. Ce dernier avait en effet constaté que, au-dessous d'une certaine température, la résistivité électrique de certains métaux (le mercure dans son cas) tombe brutalement à zéro, lors d'une transition de phase vers un état dit "supraconducteur". Cette transition s'accompagne d'autres effets spectaculaires : par exemple le fait que les champs magnétiques sont expulsés du matériau. Dans ce complément, nous nous intéresserons au mécanisme général d'appariement de fermions attractifs dans le cadre de la théorie BCS, mais nous n'entrerons dans aucun détail de la théorie des métaux. Nous admettrons simplement l'existence d'une attraction entre fermions, sans nous préoccuper de son origine précise. Dans les métaux, cette attraction effective entre électrons résulte d'un couplage entre électrons et phonons, de sorte qu'elle n'est qu'indirecte ; ceci introduit une complexité supplémentaire dans le problème. Nous ne présenterons pas non plus de calcul de résistivité métallique, et nous ne démontrerons donc pas qu'elle peut s'annuler.

La théorie BCS est une théorie de champ moyen, du même type que la théorie de Hartree-Fock (Compléments D_{XV} et E_{XV}). Dans cette dernière, on suppose que les particules individuelles se propagent de façons indépendantes dans le champ moyen créé par toutes les autres ; pour cela, on utilise un état de Fock à N particules. Ici, nous allons plutôt supposer qu'elles forment des paires, et traduire cette hypothèse en utilisant comme ket variationnel d'essai le ket $|\Psi_{BCS}\rangle$ introduit au Chapitre XVII ; ce complément fournit donc une application directe des calculs de ce chapitre. Il s'agit certes d'un état qui mathématiquement ressemble à un état de Fock de "molécules" regroupant chacune deux particules. Cependant, il ne faut pas en conclure que cette approximation se ramène à une théorie où chacune des molécules est considérée comme un objet identifiable se déplaçant dans un champ moyen créé par toutes les autres. Cette image naïve serait exacte dans le cas limite où les molécules sont très fortement liées, mais nous verrons qu'elle est totalement inappropriée dans le cadre des paires peu liées comme celles de la théorie BCS. Comme nous l'avons souligné dans l'introduction du Chapitre XVII, le but réel de l'utilisation des états appariés n'est pas d'étudier la formation de molécules, mais est d'ajouter une grande flexibilité à l'approche du champ moyen en permettant de moduler la fonction de corrélation binaire entre particules.

Dans une première partie (§ 1), nous procédons à la minimisation de l'énergie pour déterminer l'état quantique optimal dans la famille considérée. Puis, dans le § 2, nous discutons un certain nombre de propriétés physiques de la fonction d'onde BCS ainsi optimisée, principalement en termes de fonctions de corrélation à une et deux particules, mais aussi en termes de ce qui est appelé "ordre non diagonal" (Compléments A_{XVI} et A_{XVII}). Enfin, au § 3, nous étudions plus en détail le contenu physique du mécanisme d'appariement BCS permettant d'optimiser l'énergie d'un système de fermions, et en particulier le rôle du blocage de la phase (brisure spontanée de symétrie). Dans tout ce complément, nous supposons pour simplifier que la température est nulle, mais la méthode BCS s'étend à l'étude des états excités (§ 4), et donc aux situations de température non nulle (comme nous l'évoquons rapidement au § 4-d).

Peu avant que la théorie BCS ne soit mise au point, Cooper avait proposé

un modèle comprenant deux fermions attractifs et montré que l'exclusion de leurs fonctions d'onde de l'intérieur d'une sphère de Fermi faisait apparaître un état lié, dont certaines propriétés rappellent celles prédites ensuite par la théorie BCS. Cette dernière constitue donc en quelque sorte la généralisation à N particules du modèle de Cooper, généralisation qui permet de mettre en lumière les effets collectifs qui sont à l'origine des propriétés de l'état fondamental BCS. Dans le Complément D_{XVII}, nous étudierons donc le modèle de Cooper et soulignerons ses analogies avec la théorie à N particules. Dans le présent complément, nous partons directement des résultats généraux du Chapitre XVII pour présenter la théorie BCS ; nous utiliserons également les calculs de valeurs moyennes d'énergie du § 3 du Complément B_{XVII}.

Il n'est bien sûr pas envisageable de fournir ici un aperçu détaillé de la théorie de la supraconductivité et des divers effets qui en découlent, ce qui nécessiterait un ouvrage entier ; le simple fait que nous limitons une grande partie des calculs à la température nulle montre bien que de nombreux phénomènes sortent du cadre de ce complément. Pour en savoir plus, on pourra consulter la référence [8].

1. Optimisation de l'énergie

La relation (B-11) du Chapitre XVII fournit l'expression de l'état apparié¹ $|\Psi_{BCS}\rangle$:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \exp \left\{ \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right\} |0\rangle = \prod_{\otimes \mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (1)$$

Nous avons ensuite normé le ket $|\Psi_{BCS}\rangle$ en normant séparément chacun des kets $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$, qui deviennent les kets $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$:

$$|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = \left[u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right] |0\rangle \quad (2)$$

où les deux fonctions $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$ sont reliées par :

$$v_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \quad (3)$$

et satisfont :

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \quad (4)$$

Dans ce chapitre, $g_{\mathbf{k}}$ a été introduit comme la transformée de Fourier de la fonction d'onde $\chi(\mathbf{r})$ de la "molécule diatomique" servant à construire l'état apparié ; cet état est toutefois a priori quelconque. Ici, nous allons considérer les $g_{\mathbf{k}}$ comme des paramètres variationnels. Si l'on choisit $g_{\mathbf{k}} = 0$, il en découle $v_{\mathbf{k}} = 0$ et $|u_{\mathbf{k}}| = 1$: les deux états individuels \mathbf{k}, \uparrow et $-\mathbf{k}, \downarrow$ ne sont ni peuplés, ni appariés. Ils le sont, en revanche, si $g_{\mathbf{k}}$ n'est pas nul. De façon générale, le nombre de $g_{\mathbf{k}}$ non nuls est a priori arbitraire, fini ou infini ; on peut par exemple les limiter à une valeur maximale k_c du module de \mathbf{k} , et considérer cette valeur maximale comme un paramètre variationnel supplémentaire définissant le ket d'essai.

1. Cet état est une superposition de composantes contenant des nombres de particules différents. Comme nous l'avons déjà rappelé au Chapitre XVII, on pourrait également choisir un état variationnel où le nombre de particules est parfaitement fixé (§ 5.4 et Appendice C de [8]), mais cela compliquerait un peu les calculs.

Nous avons été conduits dans le chapitre à poser $u_{\mathbf{k}} = \cos \theta_{\mathbf{k}} e^{-i\zeta_{\mathbf{k}}}$ et $v_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}} e^{i\zeta_{\mathbf{k}}}$, relations qui supposent que les phases de $u_{\mathbf{k}}$ et de $v_{\mathbf{k}}$ sont opposées (ce qu'il est toujours possible d'obtenir par un changement de phase globale du ket $|\overline{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$, sans conséquence physique). Dans le présent complément, il sera plus commode de supposer que la phase de $|\overline{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ est choisie de sorte à rendre $u_{\mathbf{k}}$ réel et positif, ce qui conduit à poser :

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \cos \theta_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} &= \sin \theta_{\mathbf{k}} e^{2i\zeta_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (5)$$

La relation (C-19) du Chapitre XVII fournit le nombre moyen de particules dans l'état $|\overline{\Psi}_{BCS}\rangle$:

$$\langle N \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 = 2 \sum_{\mathbf{k}} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \quad (6)$$

1-a. Fonction à optimiser

On peut changer le nombre moyen de particules dans l'état $|\Psi\rangle_{BCS}$ en faisant varier les dépendances en \mathbf{k} des $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$: par exemple, si l'on choisit $|u_{\mathbf{k}}| = 1$ et $v_{\mathbf{k}} = 0$ pour tout \mathbf{k} , le nombre moyen $\langle N \rangle$ est nul ; en revanche, si $|u_{\mathbf{k}}|$ est très petit et $|v_{\mathbf{k}}|$ égal à 1 pour de très nombreuses valeurs de \mathbf{k} , le nombre total moyen de particules $\langle N \rangle$ peut être arbitrairement élevé. Or l'opération de minimisation de l'énergie ne peut avoir de sens que pour une valeur fixée de $\langle N \rangle$, que nous allons déterminer par un multiplicateur de Lagrange μ (potentiel chimique ; cf. Appendice VI, § 1-c). Nous allons donc optimiser le choix des $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$ en introduisant des variations $du_{\mathbf{k}}$ et $dv_{\mathbf{k}}$ et en annulant la variation de la valeur moyenne $A = \langle H \rangle - \mu \langle N \rangle$. Le volume L^3 du système physique et son potentiel chimique μ sont considérés comme donnés ; les variables à déterminer sont de façon équivalente, soit les $u_{\mathbf{k}}$ et les $v_{\mathbf{k}}$, soit les $\theta_{\mathbf{k}}$ et les $\zeta_{\mathbf{k}}$.

La relation (40) du Complément B_{XVII} fournit $\langle H \rangle$, tandis que (6) fournit $\langle N \rangle$. Nous avons donc :

$$\begin{aligned} A &= \langle H \rangle - \mu \langle N \rangle \\ &= 2 \sum_{\mathbf{k}} (e_{\mathbf{k}} - \mu) |v_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{V_0}{4} \langle N \rangle^2 + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} [V_0 - V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}] |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{k}'}|^2 \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} \end{aligned} \quad (7)$$

avec, d'après (5) :

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \quad ; \quad v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} e^{-2i\zeta_{\mathbf{k}}} \quad (8)$$

Dans l'expression de A ci-dessus, $e_{\mathbf{k}}$ est l'énergie cinétique d'une particule libre d'impulsion $\hbar \mathbf{k}$:

$$e_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (9)$$

et les $V_{\mathbf{k}}$ sont les transformées de Fourier du potentiel d'interaction $W_2(\mathbf{r})$:

$$V_{\mathbf{k}} = \frac{1}{L^3} \int d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} W_2(\mathbf{r}) \quad (10)$$

Ce potentiel étant supposé invariant par rotation, la fonction $V_{\mathbf{k}}$ ne dépend que du module k de \mathbf{k} , et elle est réelle (Appendice I, § 2.e); le potentiel est également attractif, de sorte que nous supposerons que tous les $V_{\mathbf{k}}$ sont négatifs.

Nous avons vu dans le Chapitre XVII que le premier terme de (7) est celui d'énergie cinétique, le second celui de champ moyen (terme diagonal) pour les particules de spins opposés, le troisième le terme similaire pour les particules de même spin (où terme direct et terme d'échange s'annulent mutuellement pour un potentiel de courte portée). Enfin, le quatrième terme sur la seconde ligne (qui contient $V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$) joue un rôle particulièrement important dans toute la suite de ce complément; il provient du diagramme d'annihilation-création de paires schématisé dans la Figure 4 du Complément B_{XVII}. On l'appelle souvent "terme d'appariement" (ou "pairing term" en anglais).

La relation (6) permet d'écrire :

$$d[\langle N \rangle]^2 = 2 \langle N \rangle d \langle N \rangle = 4 \langle N \rangle \sum_{\mathbf{k}} d |v_{\mathbf{k}}|^2 \quad (11)$$

Nous obtenons :

$$dA = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_k d |v_{\mathbf{k}}|^2 + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \{v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} d [u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^*] + v_{\mathbf{k}'}^* u_{\mathbf{k}'} d [u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}]\} \quad (12)$$

où la variable ξ_k est l'énergie cinétique e_k ramenée au potentiel chimique et corrigée par des effets des interactions² :

$$\xi_k = e_k - \mu + \frac{V_0}{2} \langle N \rangle + \sum_{\mathbf{k}'} (V_0 - V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}) |v_{\mathbf{k}'}|^2 \quad (13)$$

Remarque :

Dans les applications de la théorie BCS, le choix du potentiel d'interaction à utiliser dans les équations ne va pas nécessairement de soi. C'est particulièrement vrai dans la théorie de la supraconductivité dans les métaux, où les fermions mis en jeu sont des électrons qui, isolés, interagissent par un potentiel de Coulomb répulsif. Cependant, dans un métal, l'interaction répulsive directe entre les électrons est fortement écrantée et ils interagissent de façon indirecte, via les déformations du réseau cristallin (phonons, cf. Complément J_v); ce phénomène introduit une composante attractive à grande distance dans leur interaction effective, et explique pourquoi l'appariement entre électrons est possible. Les caractéristiques de cette interaction effective dépendent de celles des phonons, en particulier de la fréquence de Debye du solide considéré.

2. Un facteur 2 apparaît devant la somme sur \mathbf{k}' du fait de l'addition des variations de $|v_{\mathbf{k}}|^2$ et $|v_{\mathbf{k}'}|^2$ dans (7), mais il est absorbé par le 2 qui précède la somme contenant ξ_k .

Dans la théorie des gaz dilués fermioniques ultra-froids, ce n'est pas non plus le potentiel interatomique qui est utilisé directement dans les équations. Ce potentiel interatomique comprend à courte distance une partie fortement répulsive (parfois assimilée à un "cœur dur") et à distance intermédiaire un fort puits attractif permettant la formation d'un grand nombre d'états moléculaires. Or, lorsque le gaz étudié est très dilué, les collisions à trois corps qui permettent de former ces molécules sont très rares, de sorte que ces états moléculaires ne jouent pratiquement aucun rôle; seuls sont réellement importants les effets du potentiel à grande distance. En d'autres termes, ce sont les propriétés asymptotiques des états stationnaires de collision, contenues dans l'amplitude de diffusion (Chapitre VIII, relation B.9) et les déphasages associés (Chapitre VIII, § C) qui jouent le rôle essentiel. Le potentiel qui est utilisé dans les calculs BCS est donc un "potentiel effectif".

De plus, comme les collisions se produisent à très basse énergie, ce potentiel effectif ne dépend que du déphasage δ_0 associé à $l = 0$. On caractérise généralement ce déphasage par une "longueur de diffusion" a_0 définie par $\delta_0 \simeq -ka_0$ lorsque $k \rightarrow 0$; le potentiel effectif est attractif si cette longueur de diffusion est négative. Dans le présent complément, nous nous intéressons principalement au mécanisme quantique d'appariement BCS et non pas à la détermination d'un potentiel; nous n'entrons pas dans le détail de ces considérations, supposant que le choix du potentiel d'interaction approprié a déjà été effectué.

1-b. Annulation de la variation totale

On remarque immédiatement sur (7) que les trois premiers termes du second membre ne dépendent que des modules des $v_{\mathbf{k}}$; seul le dernier terme (annihilation-création) dépend des phases $\zeta_{\mathbf{k}}$. Or, la fonction A doit être minimale si l'on fait varier les $\zeta_{\mathbf{k}}$ sans modifier les $\theta_{\mathbf{k}}$, donc quand seul varie ce dernier terme :

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}'} \cos \theta_{\mathbf{k}'} e^{2i(\zeta_{\mathbf{k}'} - \zeta_{\mathbf{k}})} \quad (14)$$

Nous avons supposé que tous les éléments de matrice du potentiel sont négatifs, alors que la relation (C-5) du Chapitre XVII indique que les produits $\sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}}$ sont positifs. La valeur la plus basse de cette somme est donc obtenue quand tous les termes de la somme sur \mathbf{k} et \mathbf{k}' ont des phases égales, de sorte qu'ils s'ajoutent de façon cohérente. Cette condition porte le nom de "condition de blocage de phase", et nous la discuterons plus en détail au § 3-a- β . Le minimum obtenu ne dépend pas de la phase absolue des $v_{\mathbf{k}}$, mais seulement de leurs phases relatives. Nous pouvons donc simplement supposer que tous les $\zeta_{\mathbf{k}}$ sont égaux à zéro, c'est-à-dire que tous les $v_{\mathbf{k}}$ sont réels et positifs. Nous considérerons à partir de maintenant que c'est le cas.

Dans la relation (12), les termes en $d[u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^*]$ et $d[u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}]$ deviennent alors égaux (les indices \mathbf{k} et \mathbf{k}' sont muets), de sorte que :

$$dA = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} d(v_{\mathbf{k}})^2 + 2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} d(u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}) \quad (15)$$

Il nous faut maintenant faire varier les $\theta_{\mathbf{k}}$. Pour cela, introduisons alors les quantités $\Delta_{\mathbf{k}}$, homogènes à une énergie, par :

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} (-V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \quad (16)$$

Les $\Delta_{\mathbf{k}}$ sont réels puisque les $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$ le sont, et positifs puisque nous avons supposé les éléments de matrice du potentiel d'interaction négatifs. Ils sont appelées "gap" (mot anglais signifiant "intervalle"); ils jouent un rôle important en théorie BCS. Comme la discussion physique de ce rôle est plus aisée dans le cas particulier d'un potentiel de très courte portée, nous la repoussons au § 1-c; de même, l'explication du choix du mot "gap" apparaîtra plus bas (§ 4, voir en particulier la Figure 6). La variation de A s'écrit alors :

$$dA = 4 \sum_{\mathbf{k}} \xi_k v_{\mathbf{k}} dv_{\mathbf{k}} - 2 \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} [u_{\mathbf{k}} dv_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} du_{\mathbf{k}}] \quad (17)$$

Les variations $du_{\mathbf{k}}$ et $dv_{\mathbf{k}}$ ne sont toutefois pas indépendantes, puisque la relation (4) impose (lorsque $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$ sont réels) que :

$$2u_{\mathbf{k}} du_{\mathbf{k}} + 2v_{\mathbf{k}} dv_{\mathbf{k}} = 0 \quad (18)$$

de sorte que nous pouvons remplacer $du_{\mathbf{k}}$ par $-v_{\mathbf{k}} dv_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}}$. Le second membre de (17) devient alors :

$$4 \sum_{\mathbf{k}} \xi_k v_{\mathbf{k}} dv_{\mathbf{k}} - 2 \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \left[u_{\mathbf{k}} - \frac{(v_{\mathbf{k}})^2}{u_{\mathbf{k}}} \right] dv_{\mathbf{k}} \quad (19)$$

L'annulation de la variation de A par rapport à tous les $v_{\mathbf{k}}$ s'écrit donc :

$$2\xi_k v_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}} \left[u_{\mathbf{k}} - \frac{(v_{\mathbf{k}})^2}{u_{\mathbf{k}}} \right] = 0 \quad (20)$$

Une multiplication par $u_{\mathbf{k}}$ fournit :

$$2\xi_k u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}} \left[(u_{\mathbf{k}})^2 - (v_{\mathbf{k}})^2 \right] \quad (21)$$

soit :

$$\xi_k \sin 2\theta_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}} \cos 2\theta_{\mathbf{k}} \quad (22)$$

On peut alors calculer le sinus et le cosinus, puisque :

$$[\cos 2\theta_{\mathbf{k}}]^2 = \frac{[\cos 2\theta_{\mathbf{k}}]^2}{[\cos 2\theta_{\mathbf{k}}]^2 + [\sin 2\theta_{\mathbf{k}}]^2} = \frac{(\xi_k)^2}{(\xi_k)^2 + (\Delta_{\mathbf{k}})^2} \quad (23)$$

et donc :

$$\begin{aligned} \cos 2\theta_{\mathbf{k}} &= \frac{\pm \xi_k}{\sqrt{(\xi_k)^2 + (\Delta_{\mathbf{k}})^2}} = \pm \frac{\xi_k}{E_k} \\ \sin 2\theta_{\mathbf{k}} &= \frac{\pm \Delta_{\mathbf{k}}}{\sqrt{(\xi_k)^2 + (\Delta_{\mathbf{k}})^2}} = \pm \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E_k} \end{aligned} \quad (24)$$

où nous avons posé :

$$E_k = \sqrt{(\xi_k)^2 + (\Delta_{\mathbf{k}})^2} \quad (25)$$

Ainsi :

$$\begin{aligned} [u_{\mathbf{k}}]^2 &= \frac{1}{2} [1 + \cos 2\theta_{\mathbf{k}}] = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right] \\ [\bar{v}_{\mathbf{k}}]^2 &= \frac{1}{2} [1 - \cos 2\theta_{\mathbf{k}}] = \frac{1}{2} \left[1 \mp \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right] \end{aligned} \quad (26)$$

Nous trouvons donc de nombreuses possibilités pour rendre stationnaire la différence de valeurs moyennes $\langle H \rangle - \mu \langle N \rangle$, selon le signe \pm choisi dans chacune de ces équations et pour chaque \mathbf{k} . Cette multiplicité de solutions n'est pas étonnante puisque la stationnarité est obtenue, non seulement pour l'état fondamental, mais aussi pour les divers états excités possibles du système physique ; nous discuterons ces derniers au § 4, et nous verrons que les conditions de stationnarité (26) incluent la possibilité de "paires excitées" (§ 4-c- β). Pour le moment nous nous concentrons sur la recherche de l'état fondamental et donc du minimum absolu de la valeur moyenne (7).

Examinons quels signes il faut choisir dans (26) pour obtenir le niveau fondamental, c'est-à-dire donner la valeur la plus faible possible à l'expression (7) de A . Le potentiel chimique d'un gaz parfait de fermions dans son état fondamental est positif, égal à l'énergie de Fermi et proportionnel à la densité de particules à la puissance $2/3$ (Complément C_{XIV}, § 1-a). En présence d'un faible potentiel attractif, la valeur du facteur $(e_{\mathbf{k}} - \mu)$ dans le premier terme du second membre de (7) est donc négative lorsque le module \mathbf{k} est petit, positive lorsque $e_{\mathbf{k}} \gg \mu$. Dans le premier cas, pour minimiser A , il est favorable de choisir des valeurs de $[\bar{v}_{\mathbf{k}}]^2$ aussi grandes que possibles, donc le signe $-$ dans la seconde équation (26) puisque $\xi_{\mathbf{k}}$ est négatif dans ce cas ; lorsque $e_{\mathbf{k}} \gg \mu$, il est au contraire favorable de choisir des valeurs aussi faibles que possible de $[\bar{v}_{\mathbf{k}}]^2$, et c'est encore un signe $-$ dans la seconde égalité qui est préférable. Pour finir, c'est donc le signe $-$ qui convient dans la seconde égalité (26), et par conséquent le signe $+$ dans la première.

Comme nous avons vu que $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$ sont positifs, nous obtenons finalement pour l'état fondamental :

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)} \\ v_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)} \end{aligned} \quad (27)$$

Par substitution de ces résultats dans (21), on vérifie alors que les relations de stationnarité sont bien vérifiées, quel que soit le signe de $\xi_{\mathbf{k}}$. Elles s'appliquent pourvu que soit satisfaite la condition de cohérence découlant de la définition (16) des $\Delta_{\mathbf{k}}$:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \sqrt{1 - \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}'}} \right)^2} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{(\xi_{\mathbf{k}'})^2 + (\Delta_{\mathbf{k}'})^2}} \quad (28)$$

Comme nous allons le voir, cette condition (28) prend une forme plus simple pour un potentiel d'interaction de très courte portée.

La conclusion de ce calcul est que, partant d'une fonction $\chi(\mathbf{r})$ quelconque, ou (ce qui revient au même) de fonctions $g_{\mathbf{k}}$ considérées comme des variables entièrement libres, nous pouvons obtenir grâce à l'optimisation les valeurs des $u_{\mathbf{k}}$ et

des $v_{\mathbf{k}}$; ceci fixe les $g_{\mathbf{k}}$ et détermine la fonction $\chi(\mathbf{r})$ qui permet de construire l'état apparié écrit en (1).

1-c. Potentiel de courte portée, étude du gap

Les éléments de matrice du potentiel d'interaction $V_{\mathbf{k}}$ sont définis au Complément B_{XVII} comme les transformées de Fourier du potentiel – cf. relations (16) et (18) de ce complément. Pour un potentiel régulier de portée b , l'élément de matrice $V_{\mathbf{k}}$ varie nécessairement lorsque k varie d'une quantité comparable à $1/b$; en particulier, $V_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$ lorsque $k \gg 1/b$. Cependant, dans beaucoup d'applications physiques de la théorie BCS, les vecteurs d'onde k mis en jeu restent très petits devant $1/b$, de sorte qu'une approximation utile est d'ignorer les variations des $V_{\mathbf{k}}$. On les considère alors comme tous égaux à une même constante $-V$:

$$V_{\mathbf{k}} = -V \tag{29}$$

Le signe moins a été introduit afin que V soit un nombre positif pour un potentiel attractif ; ce nombre est inversement proportionnel au volume \mathcal{V} , comme l'indique la relation (10). La définition (13) de $\xi_{\mathbf{k}}$ se simplifie alors en :

$$\xi_k = e_k - \mu - \frac{V}{2} \langle N \rangle \tag{30}$$

que l'on peut reporter ensuite dans les relations (27) pour obtenir les fonctions $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$.

La relation (16) se simplifie également ; tous les $\Delta_{\mathbf{k}}$ prennent alors une même valeur Δ :

$$\Delta = V \sum_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \tag{31}$$

Il existe donc dans ce cas une seule valeur du gap, qui est réelle puisque nous avons vu que les $u_{\mathbf{k}'}$ et $v_{\mathbf{k}'}$ le sont. Nous verrons dans la suite de ce complément que Δ joue un rôle particulièrement important, en particulier dans la courbe de dispersion caractérisant les excitations du système (cf. par exemple la Figure 6 qui montre l'existence d'un minimum d'énergie Δ).

L'ensemble des formules précédentes s'applique à condition de remplacer les $\Delta_{\mathbf{k}}$ par Δ . Les relations (24) deviennent, compte tenu du choix de signe qui conduit au fondamental :

$$\begin{aligned} \cos 2\theta_{\mathbf{k}} &= \frac{\xi_k}{\sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2}} = \frac{\xi_k}{E_k} \\ \sin 2\theta_{\mathbf{k}} &= \frac{\Delta}{\sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2}} = \frac{\Delta}{E_k} \end{aligned} \tag{32}$$

Les égalités (27) restent inchangées. Lorsque $k \rightarrow \infty$, la seconde relation (32) montre que, compte tenu de (25) et (30), la valeur de $\theta_{\mathbf{k}}$ tend vers zéro selon :

$$\theta_{\mathbf{k}} \sim \Delta/2E_k \sim \Delta/2\xi_k \tag{33}$$

Il nous sera utile pour la suite de connaître le comportement asymptotique des fonctions $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$, dont (5) indique la valeur en fonction de $\theta_{\mathbf{k}}$. Quand $k \rightarrow \infty$, la relation (33) indique que $u_{\mathbf{k}}$ tend vers 1 tandis que $v_{\mathbf{k}}$ tend vers zéro selon :

$$v_{\mathbf{k}} \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\Delta}{2\xi_k} + 0\left(\frac{\Delta^2}{\xi_k^2}\right) \sim \frac{1}{k^2} + 0\left(\frac{1}{k^4}\right) \quad (34)$$

Les sommes (C-19) et (C-22) du Chapitre XVII qui donnent la valeur moyenne de \widehat{N} et de son carré sont donc bien convergentes.

α. Condition d'autocohérence et divergences

La condition d'autocohérence (28) se simplifie maintenant en :

$$\Delta = \frac{V}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{1 - \left(\frac{\xi_k}{E_k}\right)^2} = \frac{V}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{\sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2}} \quad (35)$$

soit :

$$1 = \frac{V}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2}} \quad (36)$$

qui constitue une équation implicite exprimant le gap Δ à partir de μ (puisque ce dernier intervient dans la définition de ξ_k).

Si nous prenons un grand volume L^3 , nous pouvons remplacer la somme discrète sur \mathbf{k} par une intégrale. Nous allons supposer que, comme envisagé au § 1, les $g_{\mathbf{k}}$ dans le ket variationnel (1) sont nuls lorsque le module de \mathbf{k} est plus grand qu'une valeur de coupure k_c . Dans ces conditions, l'équation implicite du gap devient :

$$1 = \frac{V}{2} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int_0^{k_c} d^3k \frac{1}{\sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2}} \quad (37)$$

où k_c est la borne supérieure des vecteurs d'onde introduite au § 1 ; rappelons que V est inversement proportionnel au volume, de sorte que le second membre de cette égalité n'en dépend pas. L'intégrale devient divergente si k_c est infini car, lorsque $k \rightarrow \infty$, la fonction à intégrer se comporte comme $1/\xi_k \sim 1/e_k \sim 1/k^2$. Il convient donc de prendre une valeur finie pour k_c , cas auquel la valeur obtenue pour Δ dépend de celle choisie pour k_c ; cette borne supérieure joue alors un rôle important.

β. Calcul du gap

Nous notons e_c l'équivalent de la fréquence de coupure k_c en termes d'énergie :

$$e_c = \frac{\hbar^2 k_c^2}{2m} \quad (38)$$

Prenons maintenant l'énergie e_k comme variable d'intégration. Il s'introduit alors la densité d'états $D(e_k)$, obtenue³ en différenciant la définition (9) de e_k :

$$D(e_k) = \frac{L^3}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{e_k} \quad (39)$$

3. Cette densité d'états est définie dans le Complément C_{XIV}, et donnée par la relation (8) de ce complément ; ici, comme nous n'avons pas à tenir compte des deux états de spin, nous obtenons une densité d'états deux fois plus petite.

La relation (37) devient alors :

$$1 = \frac{V}{2} \int_0^{e_c} D(e_k) de_k \frac{1}{\sqrt{(e_k - \bar{\mu})^2 + \Delta^2}} \quad (40)$$

où, pour simplifier la relation (30), nous avons introduit un potentiel chimique $\bar{\mu}$ relatif à l'énergie de champ moyen⁴ :

$$\bar{\mu} = \mu + \frac{V}{2} \langle N \rangle \quad (41)$$

La fonction à intégrer sur e_k dans (40) contient une fraction qui est maximale pour $e_k = \bar{\mu}$, et prend de grandes valeurs dans une bande d'énergie de largeur Δ centrée dans l'espace des \mathbf{k} sur la surface de la "sphère de Fermi" (cf. Complément C_{XIV}) dont le rayon k_F est tel que :

$$\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \mu \quad (42)$$

Quant à la densité d'états $D(e_k)$, elle prend des valeurs faibles au voisinage du centre de cette sphère, mais croissantes à l'extérieur. L'intérieur de la sphère contribue peu à la somme, qui se construit surtout à l'extérieur, entre la surface de Fermi et l'énergie de coupure e_{k_c} . Il existe donc dans cette région une valeur intermédiaire D_0 de la densité d'états qui peut être substituée à $D(e_k)$ sans changer l'intégrale, avec :

$$D(\mu) \leq D_0 \leq D(e_c) \quad (43)$$

Nous pouvons alors sortir la densité d'états de l'intégrale et écrire :

$$1 = \frac{VD_0}{2} \int_0^{e_c} de_k \frac{1}{\sqrt{(e_k - \bar{\mu})^2 + \Delta^2}} \quad (44)$$

Comme V est inversement proportionnel au volume, alors que selon (39) la densité d'états D_0 lui est proportionnelle, cette relation est indépendante du volume.

En physique des métaux supraconducteurs, l'interaction attractive entre les électrons passe par l'intermédiaire des mouvements de déplacement des ions du cristal, donc par les phonons du réseau ; dans les éléments de matrice du potentiel d'interaction, il s'introduit alors naturellement une énergie de coupure qui est l'énergie de Debye $\hbar\omega_D$ des phonons. On prend souvent un modèle simple où, dans (28), les éléments de matrice du potentiel $V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$ sont nuls dès que la différence d'énergie $|e_k - e_{k'}|$ dépasse la valeur $\hbar\omega_D$, supposée bien inférieure à $\bar{\mu}$; sinon, ils sont égaux à une constante V . Par les mêmes calculs que ceux qui nous ont menés à (44), on obtient alors la relation du gap⁵ pour les niveaux proches de la surface de Fermi :

$$1 \simeq \frac{VD_F}{2} \int_{\bar{\mu}-\hbar\omega_D}^{\bar{\mu}+\hbar\omega_D} de_k \frac{1}{\sqrt{(e_k - \bar{\mu})^2 + \Delta^2}} = VD_F \operatorname{Arg}^t \operatorname{sh} \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \right) \quad (45)$$

4. Avec la convention de signe que nous avons prise pour les V , cette énergie de champ moyen est $-V \langle N \rangle / 2$ par particule.

5. L'intégrale du second membre reçoit deux contributions égales, l'une des valeurs de e_k supérieures à $\bar{\mu}$, l'autre des valeurs inférieures ; ceci explique la disparition du facteur 1/2 dans la seconde égalité.

où D_F est la densité d'états à la surface de Fermi. Si de plus nous faisons l'approximation $VD_F \ll 1$, nous obtenons :

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_D}{\text{sh}(1/VD_F)} \simeq 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{VD_F}\right) \quad (46)$$

Cette équation importante est appelée "équation du gap BCS".

Une propriété remarquable est que cette expression n'est pas développable en série de puissances de V lorsque l'interaction tend vers zéro : toutes les dérivées de Δ par rapport à V sont nulles en $V = 0$. Elle ne peut donc pas être obtenue dans le cadre d'une théorie de perturbations en puissances de l'interaction (nous reviendrons sur ce point au § 3-c).

2. Fonctions de distribution, corrélations

Si nous reportons les formules (27) dans le ket d'essai, nous obtenons le vecteur d'état $|\Psi_{BCS}\rangle$ optimal, décrivant au mieux l'état fondamental. Examinons maintenant le contenu physique de cet état quantique optimisé en termes des propriétés des fonctions de distribution à une et deux particules. Ces propriétés nous seront utiles plus bas pour comprendre l'origine de la diminution d'énergie due à la condensation en paires de particules.

2-a. Distribution à une particule

Comme nous allons le voir, les propriétés de la distribution à une particule restent assez proches de celles d'un gaz parfait.

α. Espace des impulsions

Une fois le gap Δ obtenu, on peut utiliser les relations (30) et (32) pour déterminer les valeurs de $\theta_{\mathbf{k}}$ pour chaque valeur de \mathbf{k} ; la relation (C-16) du Chapitre XVII fournit alors le nombre moyen de particules dans chaque paire d'états. Puisque les deux états qui composent la paire jouent le même rôle, le nombre moyen de particules dans chacun des états est simplement la moitié, soit $\sin^2 \theta_{\mathbf{k}}$. La Figure 1 montre l'allure des variations en fonction de e_k de la fonction de distribution $\langle n_{\mathbf{k},\nu} \rangle$ ainsi obtenue, c'est-à-dire de la fonction de distribution en impulsions d'une particule avec les valeurs optimisées des variables $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$. Pour un gaz parfait, nous avons vu au Complément B_{XV} que c'est une distribution de Fermi-Dirac ; à température nulle (comme c'est le cas ici, puisque nous étudions l'état fondamental), cette distribution est une fonction en "marche d'escalier" égale à 1 si $e_k < \mu$ et à 0 si $e_k > \mu$ (courbe en pointillés). Ici, la transition entre 0 et 1 se fait autour de $\bar{\mu}$, donc pour une valeur du potentiel chimique déplacée par l'effet du champ moyen comme l'indique la relation (41) ; il est compréhensible que le champ moyen décale ainsi les énergies. Ce qui est plus frappant est que la courbe ne présente plus de saut discontinu, mais varie progressivement sur un domaine d'énergie dont la largeur est de l'ordre du gap Δ . Ainsi, l'effet des interactions est de dépeupler certaines paires d'états au profit d'autres ayant des énergies cinétiques plus élevées. Certains fermions sont ainsi promus depuis l'intérieur de la surface de Fermi vers l'extérieur, cet effet se produisant sur une profondeur comparable à Δ . Dans l'espace des \mathbf{k} , la perturbation introduite par les attractions est donc localisée au voisinage de cette surface ; les

fermions situés près du centre de la sphère de Fermi ne sont pas concernés, alors que ceux qui sont proches de la surface gagnent une énergie de l'ordre du gap.

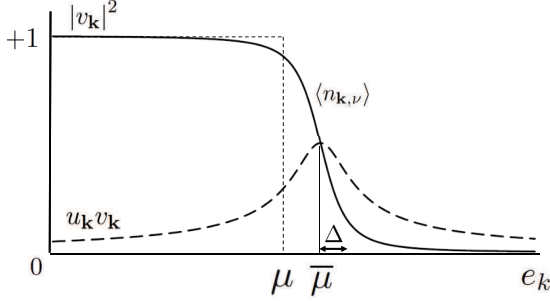


FIGURE 1 – Variations de la fonction de distribution à une particule $\langle n_{\mathbf{k},\nu} \rangle = |v_{\mathbf{k}}|^2$ en fonction de l'énergie $e_{\mathbf{k}}$, dans l'état BCS. En l'absence d'interactions, cette fonction est égale à 1 pour $e_{\mathbf{k}} < \mu$, et nulle pour $e_{\mathbf{k}} > \mu$ (courbe pointillée en marche d'escalier). En présence d'interactions attractives, sous l'effet de l'appariement entre les fermions, la courbe s'arrondit dans un domaine d'énergie de l'ordre du gap Δ (double flèche sur l'axe horizontal), et les variations se font autour de la valeur $\bar{\mu}$ (valeur de μ décalée par l'effet du champ moyen). La courbe en tirets longs montre les variations du produit $u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}$ en fonction de la même variable $e_{\mathbf{k}}$. Cette fonction prend ses valeurs les plus importantes dans un domaine de largeur de quelques Δ autour de $e_{\mathbf{k}} = \bar{\mu}$.

β . Espace des positions

Les relations (B-22) et (B-23) du Chapitre XVI conduisent à la fonction de corrélation à une particule dans l'espace des positions :

$$G_1(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu') = \langle \Psi_{\nu}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\nu'}(\mathbf{r}') \rangle = \langle \mathbf{r}', \nu' | \rho_I | \mathbf{r}, \nu \rangle \quad (47)$$

(ρ_I est l'opérateur densité réduit à une particule) soit, compte tenu de la formule (A-14) de ce Chapitre XVI appliquée à des ondes planes normées :

$$\begin{aligned} G_1(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu') &= \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}' - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \langle a_{\mathbf{k}, \nu}^{\dagger} a_{\mathbf{k}', \nu'} \rangle \\ &= \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}' - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \langle \Psi_{BCS} | a_{\mathbf{k}, \nu}^{\dagger} a_{\mathbf{k}', \nu'} | \Psi_{BCS} \rangle \end{aligned} \quad (48)$$

où $a_{\mathbf{k}, \nu}^{\dagger}$ est l'opérateur de création dans l'état individuel d'impulsion $\hbar \mathbf{k}$ et de spin ν , et $a_{\mathbf{k}', \nu'}$ celui d'annihilation dans l'état d'impulsion $\hbar \mathbf{k}'$ et de spin ν' . Or, dans l'état $|\Psi_{BCS}\rangle$, les nombres d'occupation de chaque paire d'impulsions sont 0 ou 2, de sorte que la valeur moyenne du produit de ces opérateurs s'annule lorsque chacun d'entre

eux concerne une paire différente, ou encore si les deux états individuels concernés dans la même paire sont différents. Donc :

$$\begin{aligned} G_1(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu') &= \frac{1}{L^3} \delta_{\nu\nu'} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \langle \Psi_{BCS} | a_{\mathbf{k},\nu}^\dagger a_{\mathbf{k},\nu} | \Psi_{BCS} \rangle \\ &= \frac{1}{L^3} \delta_{\nu\nu'} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \langle n_{\mathbf{k},\nu} \rangle \end{aligned} \quad (49)$$

avec :

$$\langle n_{\mathbf{k},\nu} \rangle = \langle \Psi_{BCS} | a_{\mathbf{k},\nu}^\dagger a_{\mathbf{k},\nu} | \Psi_{BCS} \rangle = |v_{\mathbf{k}}|^2 \quad (50)$$

La fonction G_1 est donc proportionnelle à la transformée de Fourier de la population moyenne $\langle n_{\mathbf{k},\nu} \rangle$ de l'état individuel \mathbf{k}, ν . Comme cette population moyenne est une fonction dont la largeur est de l'ordre du vecteur d'onde de Fermi k_F , la fonction G_1 tend vers zéro lorsque $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg 1/k_F$, c'est-à-dire dès que la différence des positions n'est plus microscopique : il n'existe donc aucun "ordre non diagonal à grande distance" de la fonction de corrélation à une particule dans ce système. Pour $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, on obtient :

$$G_1(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}, \nu') = \frac{\delta_{\nu\nu'}}{2L^3} \langle N \rangle = \delta_{\nu\nu'} \frac{n_{BCS}}{2} \quad (51)$$

où n_{BCS} est la densité numérique de particules :

$$n_{BCS} = \frac{\langle N \rangle}{L^3} \quad (52)$$

La fonction $G_1(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}, \nu)$ n'a aucune dépendance spatiale ; le facteur 1/2 correspond au fait que la densité totale n_{BCS} se répartit également entre les deux états de spin. Nous retrouvons les mêmes résultats que pour un gaz parfait.

2-b. Distribution à deux particules, fonction d'onde interne des paires

Contrairement aux propriétés de la distribution à une seule particule, celles de la distribution à deux particules sont fortement affectées par le mécanisme BCS, ce qui est naturel puisqu'il s'agit d'un processus d'appariement.

α. Espace des impulsions, pic dans la distribution

La relation (C-19) du Chapitre XV fournit l'expression des éléments de matrice de l'opérateur densité à deux particules ρ_{II} dans une base quelconque. En représentation impulsion, ils s'écrivent :

$$\langle 1 : \mathbf{k}'', \nu_3; 2 : \mathbf{k}''', \nu_4 | \rho_{II} | 1 : \mathbf{k}, \nu_1; 2 : \mathbf{k}', \nu_2 \rangle = \left\langle a_{\mathbf{k},\nu_1}^\dagger a_{\mathbf{k}',\nu_2}^\dagger a_{\mathbf{k}''',\nu_4} a_{\mathbf{k}'',\nu_3} \right\rangle \quad (53)$$

Nous nous intéresserons principalement aux éléments de matrice diagonaux caractérisant les corrélations entre impulsions de deux particules :

$$\langle 1 : \mathbf{k}, \nu; 2 : \mathbf{k}', \nu' | \rho_{II} | 1 : \mathbf{k}, \nu; 2 : \mathbf{k}', \nu' \rangle = \left\langle a_{\mathbf{k},\nu}^\dagger a_{\mathbf{k}',\nu'}^\dagger a_{\mathbf{k}',\nu'} a_{\mathbf{k},\nu} \right\rangle \quad (54)$$

Dans cette expression, les opérateurs de création repeuplent précisément les mêmes états que ceux qui ont été dépeuplés par les opérateurs d'annihilation.

Si $\nu' = \nu$, pour ne pas obtenir un résultat nul il faut que $\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}$ (sinon on obtient le carré d'un opérateur fermionique, qui est nul). Nous obtenons :

$$\langle 1 : \mathbf{k}, \nu; 2 : \mathbf{k}', \nu | \rho_{II} | 1 : \mathbf{k}, \nu; 2 : \mathbf{k}', \nu \rangle = |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{k}'}|^2 \quad (\text{si } \mathbf{k}' \neq \mathbf{k}) \quad (55)$$

et zéro si $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$; aucune corrélation n'apparaît donc si les impulsions sont différentes.

Si $\nu' = -\nu$, lorsque \mathbf{k}' est différent de $-\mathbf{k}$ deux paires différentes d'états sont mises en jeu, et l'on obtient à nouveau un produit ⁶ :

$$\langle 1 : \mathbf{k}, \nu; 2 : \mathbf{k}', -\nu | \rho_{II} | 1 : \mathbf{k}, \nu; 2 : \mathbf{k}', -\nu \rangle = |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{k}'}|^2 \quad (\text{si } \mathbf{k}' \neq -\mathbf{k}) \quad (56)$$

En revanche, si $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$, une seule paire est concernée, qui est détruite puis reconstruite par les opérateurs (il s'agit donc à nouveau d'une contribution du diagramme de la Figure 4 du Complément B_{XVII}); le calcul fait alors intervenir un seul état $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$, et l'on obtient :

$$\langle 1 : \mathbf{k}, \nu; 2 : -\mathbf{k}, -\nu | \rho_{II} | 1 : \mathbf{k}, \nu; 2 : -\mathbf{k}, -\nu \rangle = |v_{\mathbf{k}}|^2 \quad (57)$$

Ce résultat n'est pas la limite du précédent lorsque $\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}$, qui serait $|v_{\mathbf{k}}|^4$; la valeur obtenue est plus grande puisque $|v_{\mathbf{k}}|^2 \leq 1$.

Ainsi, pour toutes les valeurs des variables qui ne correspondent pas à une paire d'impulsions opposées, on constate que l'opérateur densité est simplement un produit, n'impliquant aucune corrélation entre les impulsions des deux particules. On retrouve ce qu'indiquait l'étude de l'opérateur densité à une particule, à savoir que tous les états \mathbf{k} d'impulsion plus petite que celle du niveau de Fermi sont peuplés, avec un arrondi des fonctions créé par le phénomène d'appariement. En revanche, lorsque les valeurs des impulsions et des spins sont juste opposées, comme c'est le cas pour une paire, on observe une discontinuité (une singularité) de la fonction de corrélation diagonale : elle saute de $|v_{\mathbf{k}}|^4$ à la valeur plus grande $|v_{\mathbf{k}}|^2$. La discontinuité correspondante $\delta n_{\mathbf{k}}^{(2)}$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \delta n_{\mathbf{k}}^{(2)} &= |v_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^4 = |v_{\mathbf{k}}|^2 [1 - |v_{\mathbf{k}}|^2] \\ &= |u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}|^2 \end{aligned} \quad (58)$$

Nous verrons ci-après (§ 2-b-β) que $\delta n_{\mathbf{k}}^{(2)}$ n'est autre que le carré de la composante \mathbf{k} de la fonction d'onde de paires. Cette discontinuité est notable pour les valeurs de \mathbf{k} où le produit $u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}$ prend ses valeurs les plus grandes; la Figure 1 montre que cela correspond à une région centrée à la surface de Fermi, avec une largeur en énergie qui est de l'ordre du gap Δ .

La fonction de distribution en impulsions dépend des 6 composantes des deux impulsions, ce qui ne permet pas une représentation graphique aisée. Pour simplifier,

6. Si $\nu = -$, on utilise le fait que la fonction $v(\mathbf{k})$ est paire pour obtenir ce résultat. Si $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$, deux paires sont encore concernées, repérées par des valeurs opposées de l'impulsion (rappelons que, par convention, chaque paire est repérée par l'impulsion de la particule de spin +); mais, à nouveau, la parité de $\nu(\mathbf{k})$ permet d'obtenir $|v(\mathbf{k})|^4$, de sorte que l'on retrouve bien (56).

nous supposons que les deux impulsions des particules $\hbar\mathbf{k}_1$ et $\hbar\mathbf{k}_2$ sont parallèles, de sorte que la distribution à représenter devient une surface dans l'espace à 3 dimensions : on porte k_1 sur un axe, k_2 sur un autre, et la probabilité sur le troisième axe perpendiculaire. Pour obtenir des courbes, on coupe ensuite cette surface par des plans parallèles à la première bissectrice des axes k_1 et k_2 ; on suppose donc la différence $D = k_1 - k_2$ constante, et on prend comme variable la somme de ces deux impulsions. L'axe horizontal de la Figure 2 représente donc la variable q sans dimension :

$$q = \frac{k_1 + k_2}{2k_F} \quad (59)$$

Lorsque q varie, le point représentatif dans le plan k_1, k_2 se déplace selon une droite ; si par exemple la différence D est nulle, le point se déplace le long de la première bissectrice des axes ; si D n'est pas nul, il se déplace parallèlement à cette première bissectrice. Pour le tracé de la figure, on a choisi $\Delta/e_F = 1/10$.

Avec une valeur fixe de $D = k_1 - k_2$, il faut poser $q = 0$ pour attribuer des valeurs opposées aux deux composantes des vecteurs d'onde ; ces valeurs sont $k_1 = D/2$ et $k_2 = -D/2$. Mais nous avons vu que la discontinuité est importante lorsque $k_1 = -k_2 \simeq \pm k_F$, c'est-à-dire lorsque $D \simeq \pm 2k_F$. Sur la partie gauche de la Figure 2, la différence D est prise égale à $(1.4) \times k_F$; la courbe obtenue est presque carrée, arrondie par le fait que Δ n'est pas nul (comme sur la Figure 1), et ne présente qu'un pic à peine visible. Sur la partie droite de la Figure 2, la différence des impulsions est prise égale à $2\hbar k_F$, de sorte que les deux impulsions peuvent maintenant tomber à la fois dans la partie arrondie des distributions. On constate alors que, sur le piédestal, vient se superposer un pic étroit traduisant un surcroît de population dans le niveau d'impulsion totale nulle. La hauteur du pic sur la figure donne la valeur de cette population, et sa largeur est strictement nulle pour des niveaux discrets. La singularité de la fonction de distribution en impulsions est alors nettement visible.

Il apparaît donc une singularité dans la distribution de l'impulsion des paires de particules, dont le centre de masse présente une condensation dans l'espace des impulsions. Cette condensation reste cependant partielle : contrairement au cas des bosons, le pic de condensation apparaît sur un piédestal dû à la présence d'une majorité de paires non condensées. Seules sont en fait concernées les paires d'états dont les deux constituants ont des énergies tombant dans une bande de largeur de l'ordre du gap Δ autour du niveau de Fermi e_F . Malgré ces restrictions, il reste vrai que le phénomène de condensation en paires attractives BCS manifeste des propriétés qui le rattachent à la même famille que la condensation de Bose-Einstein pour des bosons répulsifs. Le § 2-b- γ du Complément A_{XVII} discute le lien qui existe entre cette condensation et l'apparition d'un paramètre d'ordre pour le champ de paires.

β . Espace des positions, corrélations décrites par la fonction d'onde de paires

Nous n'avons trouvé aucun effet des interactions sur G_1 . Mais à nouveau, puisque la théorie BCS s'appuie sur la prise en compte d'appariements, on peut s'attendre à ce qu'elle présente des propriétés plus intéressantes concernant les fonctions de corrélation à deux particules. Ce sont elles que nous étudions maintenant, en nous limitant cependant à la fonction de corrélation "diagonale" telle qu'elle est

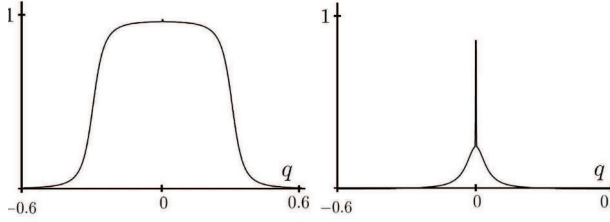


FIGURE 2 – Courbes représentant la fonction de distribution de deux particules d’impulsions parallèles \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 en fonction de la somme de ces impulsions, exprimée par la variable sans dimension $q = (k_1 + k_2)/2k_F$; on a choisi $\Delta/e_F = 1/10$.

Pour la courbe de gauche, la différence $(k_1 - k_2)$ est fixée et égale à $(1.4) \times k_F$. La courbe se présente comme celle d’une fonction en cloche, pratiquement constante pour de petites valeurs de q , et décroissante pour de plus grandes valeurs par un arrondi semblable à celui de la figure 1 (arrondi d’autant plus abrupt que Δ a été choisi petit). Aucune singularité de la distribution n’est clairement visible (à part un pic minuscule à l’origine).

Pour la courbe de droite, la différence des impulsions est choisie égale à $2\hbar k_F$; lorsque q est proche de zéro, les deux impulsions prennent alors simultanément des valeurs qui tombent dans la partie arrondie des distributions à une particule. Une singularité en $q = 0$ est maintenant clairement visible, signalant l’accumulation de “molécules” dans un état où leur centre de masse est immobile. La hauteur du pic central correspond à la population du niveau discret d’impulsion totale nulle, et sa largeur est nulle puisqu’il s’agit d’un niveau discret.

définie par la relation (B-33) du Chapitre XVI, avec l’inclusion des variables de spin comme dans (B-36). Cette fonction s’écrit :

$$\begin{aligned} G_2(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu') &= \langle \Psi_\nu^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_{\nu'}^\dagger(\mathbf{r}') \Psi_{\nu'}(\mathbf{r}') \Psi_\nu(\mathbf{r}) \rangle \\ &= \langle 1 : \mathbf{r}, \nu; 2 : \mathbf{r}', \nu' | \rho_{II} | 1 : \mathbf{r}, \nu; 2 : \mathbf{r}', \nu' \rangle \end{aligned} \quad (60)$$

(ρ_{II} est l’opérateur densité réduit à deux particules) soit, comme plus haut :

$$G_2(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu') = \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''} e^{i[(\mathbf{k}-\mathbf{k}''') \cdot \mathbf{r} + (\mathbf{k}'-\mathbf{k}'') \cdot \mathbf{r}']} \langle a_{\mathbf{k}'''}^\dagger, \nu a_{\mathbf{k}'', \nu'}^\dagger a_{\mathbf{k}', \nu'} a_{\mathbf{k}, \nu} \rangle \quad (61)$$

La calcul de la valeur moyenne du produit de quatre opérateurs qui figure dans cette expression est du même type que celui effectué au § 3 du Complément B_{XVII} pour l’énergie moyenne d’interaction, mais dans le cas présent les indices de spin sont fixés au lieu d’être des indices de sommation. La figure 3 schématise par un diagramme chacun des termes de (61) : les flèches entrantes représentent les particules qui disparaissent lors de l’interaction (effet des opérateurs d’annihilation), les flèches

sortantes celles qui apparaissent (effet des opérateurs de création) ; chaque valeur de \mathbf{k} est associée avec une valeur de la position \mathbf{r} , via une exponentielle $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ pour les flèches entrantes ou une exponentielle $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ pour les flèches sortantes, ainsi qu'à une valeur du spin ν .

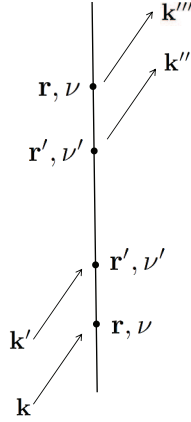


FIGURE 3 – Ce diagramme symbolise chaque terme intervenant dans la fonction de corrélation binaire. Les deux flèches en bas à gauche sont les flèches entrantes, représentant les particules qui disparaissent dans le processus d'interaction sous l'effet des deux opérateurs d'annihilation ; les deux flèches en haut à droite sont les flèches sortantes, représentant les particules qui apparaissent dans le processus sous l'effet des deux opérateurs de création. Les deux premières sont associées à une exponentielle imaginaire de la position avec un coefficient positif dans l'exposant, les deux dernières à une exponentielle imaginaire de coefficient négatif. Les indices ν repèrent les spins.

Spins parallèles : si $\nu = \nu'$, les deux opérateurs de destruction concernent nécessairement des paires de \mathbf{k} différents. Pour restaurer la population des deux couples d'états à une valeur paire, la seule possibilité est de redonner à chacune sa valeur initiale ; sinon le résultat est nul. Nous devons donc avoir, soit $\mathbf{k} = \mathbf{k}'''$ et $\mathbf{k}' = \mathbf{k}''$ (terme direct), soit $\mathbf{k} = \mathbf{k}''$ et $\mathbf{k}' = \mathbf{k}'''$ (terme d'échange). Dans le premier cas, nous obtenons (après deux anticommutations dont les effets sur le signe s'annulent) un résultat⁷ indépendant des variables de position :

$$\frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | a_{\mathbf{k}, \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}, \nu} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}'} | a_{\mathbf{k}', \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}', \nu} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}'} \rangle = \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{k}'}|^2 \quad (62)$$

et dans le second (après une seule anticommutation) :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} | a_{\mathbf{k}, \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}, \nu} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}} \rangle \langle \bar{\varphi}_{\mathbf{k}'} | a_{\mathbf{k}', \nu}^\dagger a_{\mathbf{k}', \nu} | \bar{\varphi}_{\mathbf{k}'} \rangle \\ = -\frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{k}'}|^2 \end{aligned} \quad (63)$$

7. Si $\nu = -$, il faut changer le signe de \mathbf{k} et \mathbf{k}' dans $v(\mathbf{k})$ et $v(\mathbf{k}')$ mais, comme plus haut, cela ne change pas le résultat puisqu'il est possible de changer le signe des variables de sommation.

Regroupons ces deux contributions et utilisons (6); il vient :

$$G_2(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', \nu) = \left(\frac{\langle N \rangle}{2L^3} \right)^2 \left[1 - [F(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]^2 \right] \quad (64)$$

avec un terme d'échange contenant la fonction (réelle) :

$$F(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |v_{\mathbf{k}}|^2 \quad (65)$$

Ce résultat a la même forme que la relation (22) du Complément A_{XVI}, compte tenu du fait que la population de chaque état de spin est la moitié de $\langle N \rangle$. Il indique que la fonction de corrélation pour deux spins parallèles présente un "trou d'échange" très semblable à celui représenté sur la figure 2 de ce complément, mais de forme légèrement différente puisqu'ici les fonctions $|v_{\mathbf{k}}|^2$ ne sont plus exactement des fonctions discontinues en marche d'escalier. La largeur de ce trou d'échange est de l'ordre de l'inverse de k_F , le nombre d'onde de Fermi relié à l'énergie de Fermi e_F par $e_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$.

Spins opposés : si $\nu \neq \nu'$, il devient possible que les deux opérateurs d'annihilation, ou ceux de création, concernent une même paire d'états; il s'agit alors d'un terme d'annihilation-crédation de paire (terme de catégorie **II** selon la classification du § D-1-a du Chapitre XVII). La Figure 4 symbolise les trois types de diagrammes intervenant dans le calcul de la fonction de corrélation pour des spins opposés : **I** (diffusion vers l'avant), **II** (paire-paire) et **III** (cas particuliers). Le calcul de leur somme a été effectué au § D-2 du même chapitre, et a conduit au résultat :

$$G_2(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', -\nu) \simeq \left[\frac{\langle N \rangle}{2L^3} \right]^2 + |\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|^2 \quad (66)$$

avec la définition suivante de la "fonction d'onde des paires" (non normée)⁸ $\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$:

$$\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{\Delta}{2L^3} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{(\xi_{\mathbf{k}})^2 + \Delta^2}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (67)$$

qui n'est autre que la fonction d'ondes de paires déjà introduite par la relation (D-14) du Chapitre XVII. Nous retrouvons ainsi les égalités (38) et (39) du Complément A_{XVII}, où elle était obtenue par une méthode différente mettant en jeu l'opérateur champ à deux particules. La présence du second terme dans le membre de droite de (66) provient donc de l'existence d'une valeur moyenne non nulle de champ de paires introduit dans ce même complément (non-nullité du paramètre d'ordre).

Ainsi, lorsque leurs spins sont opposés, deux particules peuvent présenter une corrélation spatiale, contrairement à ce qui se produit pour un gaz parfait

8. Le facteur $1/L^3$ qui figure dans (67) permet de définir une fonction d'onde de paires qui est indépendante de la dimension L du système physique à la limite des grands L , où la somme sur les \mathbf{k} devient une intégrale sur d^3k multipliée par $(L/2\pi)^3$. Le carré de cette fonction d'onde n'est alors pas homogène à l'inverse d'un volume, comme c'est habituellement le cas pour la fonction d'onde d'une particule, mais à $1/L^6$. En fait, il faut la considérer comme une fonction d'onde à deux particules, qui est le produit de la fonction d'onde constante $1/L^{3/2}$ du centre de masse de la paire (dont nous avons supposé l'impulsion nulle) par celle qui décrit sa variable de position relative.

(Complément A_{XVI}). Elle est décrite par le module au carré de la fonction d'onde $\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, définie par sa transformée de Fourier spatiale $u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}$. Cette nouvelle fonction d'onde, distincte de celle qui nous a servi au départ pour construire la fonction d'onde d'essai à N particules, a été introduite au § D-2 du Chapitre XVII, ainsi que dans le Complément A_{XVII} à partir de l'opérateur champ de paires. La corrélation spatiale qu'elle caractérise est de nature purement dynamique, puisqu'elle n'existe pas en l'absence d'interactions. Nous reviendrons au § 3-a- α sur ses conséquences physiques en termes d'énergie potentielle.

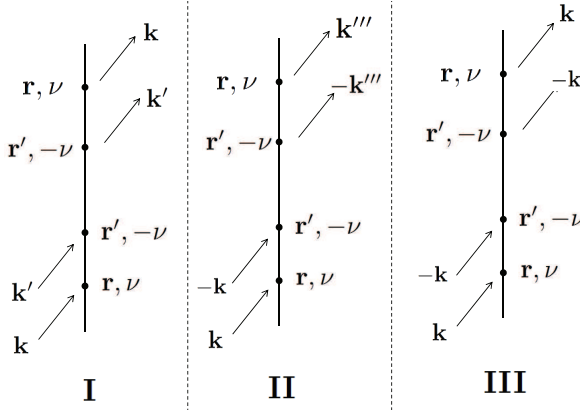


FIGURE 4 – Diagrammes symbolisant diverses contributions à la fonction de corrélation binaire pour des spins opposés ($\nu \neq \nu'$). Le diagramme de type **I** correspond à un processus où deux particules de spin opposé sont détruites, puis re-crées exactement dans les mêmes états individuels (diffusion vers l'avant). Celui de type **II** correspond à un processus où deux particules d'une même paire sont détruites, puis deux particules sont créées dans les états d'une autre paire (processus d'annihilation-création de paires). Enfin, celui de type **III** est un cas particulier des précédents, de sorte qu'il apporte une contribution négligeable. C'est le diagramme de type **II** qui introduit la dépendance spatiale de la fonction de corrélation.

Discussion : dans le membre de droite de (66), le premier terme ne contient aucune dépendance spatiale ; il correspond simplement à la fonction de corrélation d'un ensemble de particules indépendantes. Le second terme, en revanche, dépend de la différence des positions $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$; nous discutons maintenant son origine physique comme un effet d'interférence quantiques.

Ce second terme provient de la contribution des annihilations-créations de paires, pour lesquelles dans (61) on a $k = -k'$ et $k'' = -k'''$. Montrons qu'en le “coupant en deux en leur milieu”, il apparaît comme un terme d'interférence. En effet, la valeur moyenne des opérateurs qui y figurent lorsque $\nu' = -\nu$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \left\langle a_{\mathbf{k}''', \nu}^\dagger a_{-\mathbf{k}''', -\nu}^\dagger a_{-\mathbf{k}, -\nu} a_{\mathbf{k}, \nu} \right\rangle &= \langle \Psi_{BCS} | a_{\mathbf{k}''', \nu}^\dagger a_{-\mathbf{k}''', -\nu}^\dagger a_{-\mathbf{k}, -\nu} a_{\mathbf{k}, \nu} | \Psi_{BCS} \rangle \\ &= \left\langle \tilde{\Psi}(\mathbf{k}''') \left| \tilde{\Psi}(\mathbf{k}) \right. \right\rangle \end{aligned} \quad (68)$$

où $|\tilde{\Psi}(\mathbf{k})\rangle$ est défini par :

$$|\tilde{\Psi}(\mathbf{k})\rangle = a_{-\mathbf{k},-\nu} a_{\mathbf{k},\nu} |\Psi_{BCS}\rangle \quad (69)$$

La relation (66) devient alors :

$$G_2(\mathbf{r}, \nu; \mathbf{r}', -\nu) \simeq \left[\frac{\langle N \rangle}{2L^3} \right]^2 + \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'''} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}''') \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \langle \tilde{\Psi}(\mathbf{k}''') | \tilde{\Psi}(\mathbf{k}) \rangle \quad (70)$$

On peut donc interpréter le terme dépendant des positions dans la fonction de corrélation comme résultant de l'interférence entre un processus où deux particules d'une même paire $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$ sont annihilées, et un autre processus où ce sont deux particules d'une paire $(\mathbf{k}''', -\mathbf{k}''')$ qui sont annihilées ; ces deux processus sont schématisés sur la Figure 5.

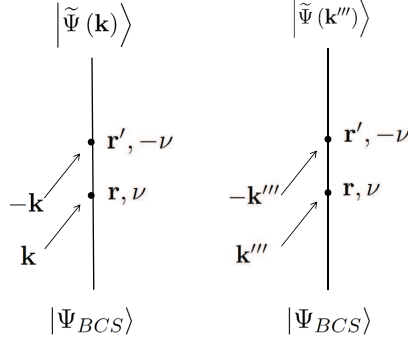


FIGURE 5 – Diagrammes symbolisant deux processus d'annihilation de paires dans l'état initial $|\Psi_{BCS}\rangle$, qui conduisent respectivement aux états $|\tilde{\Psi}(\mathbf{k})\rangle$ et $|\tilde{\Psi}(\mathbf{k}''')\rangle$. Comme ces deux états ne sont pas orthogonaux, il en résulte un effet d'interférence qui est responsable de la partie de la fonction de corrélation binaire dépendant des positions.

D'après (1) et (69), on a :

$$|\tilde{\Psi}(\mathbf{k})\rangle = v_{\mathbf{k}} |n_{\mathbf{k}} = 0; n_{-\mathbf{k}} = 0\rangle \prod_{\otimes \mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}'}\rangle \quad (71)$$

Si $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'''$, les deux états $|\tilde{\Psi}(\mathbf{k})\rangle$ et $|\tilde{\Psi}(\mathbf{k}''')\rangle$ ne sont ni identiques, ni orthogonaux ; ils sont en fait identiques pour toutes leurs composantes sur les paires d'états autres que $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$ et $(\mathbf{k}''', -\mathbf{k}''')$, mais ces deux paires ne partagent que leur composante sur les états où les 4 populations sont nulles. On en déduit alors que :

$$\langle \tilde{\Psi}(\mathbf{k}''') | \tilde{\Psi}(\mathbf{k}) \rangle = v_{\mathbf{k}'''}^* u_{\mathbf{k}'''} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \quad (72)$$

et le report de ce résultat dans (70) permet de retrouver (66). La dépendance spatiale de cette expression provient donc bien de l'interférence entre les deux processus schématisés sur la Figure 5.

On peut également utiliser la relation (68) du Complément A_{XVII} pour exprimer le produit $\Psi_{\nu'}(\mathbf{r}')\Psi_{\nu}(\mathbf{r})$ en fonction d'une somme d'opérateurs d'annihilation de paires. C'est une autre façon de voir comment interviennent les paires dans la détermination de la forme (66) de la fonction de corrélation binaire.

2-c. Propriétés de la fonction d'onde de paires, longueur de cohérence

La fonction d'onde de paires joue un rôle important en théorie BCS, et pas uniquement pour les fonctions de corrélations binaires comme nous l'avons vu. Sa portée détermine la longueur de cohérence du système physique ; de plus, sa norme est reliée au nombre de quantas présents dans le champ de paires condensées (Complément A_{XVII}).

α. Allure de la fonction d'onde de paires

Puisque les fonctions $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$ ne dépendent que du module de \mathbf{k} , nous pouvons appliquer les formules de la transformée de Fourier dans ce cas – cf. Appendice I, relation (59). Si l'on assimile la somme discrète à une intégrale, la fonction d'onde des paires devient alors :

$$\begin{aligned}\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}) &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d^3k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\Delta}{r} \int_0^\infty k dk \frac{1}{\sqrt{(e_k - \bar{\mu})^2 + \Delta^2}} \sin kr\end{aligned}\quad (73)$$

La fonction d'onde des paires est donc réelle. La Figure 1 montre l'allure des variations de la fonction $u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}$ en fonction de l'énergie e_k , maximale au voisinage de la surface de la sphère de Fermi, avec un pic de largeur comparable à Δ . Nous étudions plus en détail le rôle de la fonction d'onde de paires dans les fonctions de corrélation au § 2-c du Complément A_{XVII}.

La transformée de Fourier de $\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r})$ est donc concentrée autour des valeurs du module de \mathbf{k} de l'ordre du vecteur d'onde de Fermi k_F . Sa largeur δk est telle que la variation d'énergie e_k soit de l'ordre du gap Δ , ce qui correspond à la condition :

$$\frac{\hbar^2}{2m} 2k_F \delta k \simeq \Delta \quad \text{soit} \quad \frac{\delta k}{k_F} \simeq \frac{\Delta}{e_F}\quad (74)$$

Cette fonction d'onde oscille⁹ donc en fonction de la position \mathbf{r} , à une fréquence spatiale donnée approximativement par le vecteur d'onde à la surface de Fermi. Elle s'amortit sur une longueur de l'ordre de la quantité ξ_{paire} définie par (le facteur arbitraire $2/\pi$ est introduit pour correspondre à la définition usuelle dans la littérature) :

$$\xi_{\text{paire}} = \frac{2}{\pi \delta k} = \frac{2\hbar^2 k_F}{\pi m \Delta} = \frac{1}{k_F} \frac{4e_F}{\pi \Delta}\quad (75)$$

9. L'existence de cette oscillation est confirmée par le fait que son intégrale dans tout l'espace est pratiquement nulle ; cette intégrale est proportionnelle à $u(0)v(0)$, soit $u(0)\sqrt{1-u(0)}$, qui est pratiquement nul puisque $u(0) \simeq 1$.

soit, en ordre de grandeur, la distance entre fermions multipliée par le rapport e_F/Δ , très supérieur à 1. Chaque paire de fermions s'étend sur un volume relativement grand, de sorte qu'il existe un fort recouvrement entre paires. Dans un supraconducteur, la longueur ξ_{paire} s'appelle la "longueur de cohérence"; elle caractérise la capacité du système physique à s'adapter à des contraintes spatiales, et de ce fait joue un rôle analogue à la "longueur de relaxation" dans les systèmes de bosons condensés¹⁰.

L'appariement modifie donc de façon significative la fonction de corrélation pour des spins opposés, puisque les particules deviennent corrélées (alors que ce n'était absolument pas le cas pour le gaz parfait). Cette corrélation est positive, ce qui indique une tendance à un groupement (l'opposé d'une exclusion de Pauli); c'est précisément ce qui permet une diminution de l'énergie d'attraction entre particules. En revanche, l'appariement n'a pas d'effet marquant sur la fonction de corrélation de particules ayant la même direction de spin, qui reste semblable à celle d'un gaz parfait, avec un trou d'échange de largeur de l'ordre de $1/k_F$. La relation (75) indique que la largeur de ce trou d'échange est bien plus faible que la distance ξ_{paire} sur laquelle se produit la modification de la fonction de corrélation pour des spins opposés.

Nous remarquons à nouveau que la fonction d'onde de paires n'a d'ailleurs plus grand chose de commun avec la fonction d'onde initiale $\chi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ utilisée dans le Chapitre XVII pour construire le ket variationnel à N particules, puisque (3) indique que la transformée de Fourier de χ est $g_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}}$. Mais cela n'a rien d'étonnant : lorsque l'on construit le ket d'essai par action répétée du même opérateur de création de paires, on ne juxtapose pas ainsi de telles paires, car les effets de l'antisymétrisation sont dominants : dans chaque terme du développement de la puissance P de l'opérateur $g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger$ dans (1), le résultat obtenu est nul chaque fois que la même valeur de \mathbf{k} est répétée (le carré d'un opérateur de création fermionique est nul ; deux fermions ne peuvent pas occuper le même état individuel). C'est pourquoi les effets de l'antisymétrisation remodelent complètement les paires formées dans le système de N particules identiques.

β . Norme de la fonction d'onde de paires

Selon la relation (67), la composante sur $|\mathbf{k}\rangle$ du ket $|\phi_{\text{paire}}\rangle$ associé à la fonction d'onde $\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r})$ s'écrit :

$$\langle \mathbf{k} | \phi_{\text{paire}} \rangle = \frac{1}{L^{3/2}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \tag{76}$$

(les fonctions $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$ sont paires). Le carré de la norme de ce ket est donc :

$$\langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} |u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}|^2 \tag{77}$$

10. La longueur de cohérence ξ_{paire} ne doit pas être confondue avec la "distance de pénétration" (de London) qui caractérise l'expulsion du champ magnétique d'un supraconducteur, et qui dépend de la charge des particules.

Si nous remplaçons la somme discrète par une intégrale, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle &= \frac{1}{L^3} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \int d^3k |u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}|^2 \\ &= \frac{\Delta^2}{4L^3} \int_0^\infty D(e_k) \frac{de_k}{(e_k - \bar{\mu})^2 + \Delta^2} \end{aligned} \quad (78)$$

où, dans la seconde égalité, nous avons pris e_k comme variable d'intégration, moyennant l'introduction de la densité d'états $D(e_k)$ définie en (39). La fonction à intégrer converge puisque $D(e_k)$ varie en $\sqrt{e_k}$; la fonction à intégrer est concentrée autour de $e_k = \bar{\mu}$, avec une largeur $\Delta \ll \bar{\mu}$, de sorte qu'il est possible avec une bonne approximation de remplacer $D(e_k)$ par sa valeur D_F pour l'énergie de Fermi, et de remplacer la borne inférieure de l'intégrale par $-\infty$. Comme l'intégrale d'une fonction de Lorentz est connue (Appendice II, § 1.b) :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{de_k}{(e_k - \bar{\mu})^2 + \Delta^2} = \frac{\pi}{\Delta} \quad (79)$$

nous obtenons :

$$\langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle = \frac{\pi}{4L^3} D_F \Delta \quad (80)$$

Nous montrons au § 2-a- β du Complément A_{XVII} que la norme $\sqrt{\langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle}$ donne la valeur moyenne du champ $\langle \Phi_{\text{paire}}(\mathbf{R}) \rangle$, donc le paramètre d'ordre. Puis, au § 2-b- β de ce même complément, nous montrons que le carré de la norme $\langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle$ donne le comportement à grande distance de la valeur moyenne $\langle \Phi_{\text{paire}}^\dagger(\mathbf{R}) \Phi_{\text{paire}}(\mathbf{R}') \rangle$; la quantité $\langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle$ est reliée¹¹ à l'intensité du champ de paires (ou, si l'on préfère, au nombre total de quanta dans ce champ).

D'autre part, nous venons de voir au § 2-b- α ci-dessus qu'un pic de la distribution d'impulsions signale la présence d'une condensation de Bose-Einstein. Le report de (76) dans (58) montre que la hauteur de ce pic est :

$$\delta n_{\mathbf{k}}^{(2)} = |u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}|^2 = L^3 |\langle \mathbf{k} | \phi_{\text{paire}} \rangle|^2 \quad (81)$$

Le nombre total de particules associé à ce pic est :

$$\sum_{\mathbf{k}} \delta n_{\mathbf{k}}^{(2)} = L^3 \langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle = \frac{\pi}{4} D_F \Delta \quad (82)$$

Le carré de la norme $\langle \phi_{\text{paire}} | \phi_{\text{paire}} \rangle$, multiplié par le volume, apparaît donc également comme le nombre total des particules dans le pic de condensation que nous avons trouvé au § 2-b- α , ce qui confirme l'interprétation précédente.

11. Les opérateurs champ de paires Φ_{paire} et $\Phi_{\text{paire}}^\dagger$ ne satisfont pas exactement à des relations de commutation de bosons (Complément A_{XVII}); l'opérateur $\Phi_{\text{paire}}^\dagger \Phi_{\text{paire}}$ n'est donc pas, stricto sensu, un opérateur donnant le nombre de quanta dans le champ de paires.

$\gamma.$ *Lien avec l'énergie d'interaction*

Le terme d'énergie de la troisième ligne de (7) s'écrit, dans l'approximation (29) du potentiel de portée nulle :

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} &= -V \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} \\ &= -VL^6 |\phi_{\text{paire}}(0)|^2 \end{aligned} \quad (83)$$

Ce résultat donne une énergie proportionnelle à V et à la probabilité que, à l'intérieur d'une paire de particules qui seraient décrites par la fonction d'onde $\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r})$, les deux constituants se trouvent au même point ; cela s'explique par le fait que la taille des paires est très grande devant la portée du potentiel d'interaction.

$\delta.$ *Ordre non diagonal*

Dans l'étude de la condensation de Bose-Einstein pour des bosons, nous avons montré au § 3 du Complément A_{XVI} que la fonction de corrélation non diagonale à une particule ne tendait pas vers zéro à grande distance lorsqu'une fraction significative des particules occupent le même état individuel. Nous avons cependant constaté au § 2-a du présent complément que ce n'est pas le cas pour un système de fermions appariés, où l'ordre non diagonal tend vers zéro sur une distance microscopique ; cela se comprend physiquement, puisque l'on n'a pas accumulation de particules dans le même état quantique individuel. En revanche, nous avons vu au § 2-b- α que le centre de masse de paires de particules présente un phénomène d'accumulation partielle qui rappelle une condensation de Bose-Einstein. Il est donc naturel d'explorer les propriétés des fonctions non diagonales pour des paires, et de calculer la valeur moyenne "non diagonale en positions" :

$$\left\langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}') \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \right\rangle \quad (84)$$

Avec deux positions \mathbf{r}' à droite et deux positions \mathbf{r} à gauche, cette expression est l'exacte transposition à deux particules de la fonction non diagonale à une particule : on annihile un doublet de particules de spins opposés en un point \mathbf{r}' , puis on les recrée en un point différent \mathbf{r} . De façon plus générale, nous allons évaluer la valeur moyenne à 4 points :

$$\left\langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}'_2) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}'_1) \right\rangle \quad (85)$$

qui, par un calcul semblable à celui effectué pour les fonctions à une seule particule, s'écrit :

$$\begin{aligned} &\left\langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}'_2) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}'_1) \right\rangle \\ &= \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''} e^{i[(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'_1 + \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'_2) - (\mathbf{k}'' \cdot \mathbf{r}_2 + \mathbf{k}''' \cdot \mathbf{r}_1)]} \left\langle a_{\mathbf{k}'''}^{\dagger} a_{\mathbf{k}''}^{\dagger} a_{\mathbf{k}', \downarrow} a_{\mathbf{k}, \uparrow} \right\rangle \end{aligned} \quad (86)$$

Dans cette égalité, les éléments de matrice sont les mêmes que ceux déjà évalués au § 2-b-β. Nous allons montrer que l'on obtient alors :

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}'_2) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}'_1) \rangle \\ & = G_1(\mathbf{r}_1, \uparrow; \mathbf{r}'_1, \uparrow) G_1(\mathbf{r}_2, \downarrow; \mathbf{r}'_2, \downarrow) + \phi_{\text{paire}}^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \end{aligned} \quad (87)$$

où la distribution non diagonale à une particule G_1 est définie en (49) dans le cas $\nu = \nu'$, et où la fonction d'onde de paires ϕ_{paire} a été définie en (67). Cette égalité est identique à la relation (72) du Complément A_{XVII}, mais nous l'obtenons ici par une autre méthode.

Démonstration :

Pour le calcul de l'expression (86), comme nous l'avons déjà fait à plusieurs reprises, nous distinguons plusieurs cas :

(I) Termes de diffusion vers l'avant ; si les opérateurs de destruction ne concernent pas deux états de la même paire ($\mathbf{k} \neq \pm \mathbf{k}'$), le terme n'est non nul que si $\mathbf{k}''' = \mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'' = \mathbf{k}'$, et il s'écrit :

$$\frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_1) + \mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_2)]} |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{k}'}|^2 = G_1(\mathbf{r}_1, \uparrow, \mathbf{r}'_1, \uparrow) G_1(\mathbf{r}_2, \downarrow, \mathbf{r}'_2, \downarrow) \quad (88)$$

Nous avons déjà mentionné à plusieurs reprises, par exemple au Chapitre XVII (§ D-1-a), que les contraintes sur les indices de sommation \mathbf{k} pouvaient être ignorées si la dimension L du système physique est macroscopique ; les deux sommations deviennent alors indépendantes.

(II) Termes d'annihilation-création de paires différentes ; si $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$ et $\mathbf{k}'' = -\mathbf{k}'''$ mais $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'''$ (annihilation-création de paires différentes), nous obtenons la contribution :

$$\frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}''} e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) - \mathbf{k}'' \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)]} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}''} v_{\mathbf{k}''}^* = \phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \phi_{\text{paire}}^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \quad (89)$$

Comme de plus la fonction $\phi_{\text{paire}}(\mathbf{r})$ est paire, nous obtenons ainsi effectivement le second terme du second membre de (87).

(III) Si $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$ et $\mathbf{k}'' = -\mathbf{k}'''$, et de plus $\mathbf{k} = \mathbf{k}'''$ (annihilation-création de la même paire), nous obtenons :

$$\frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}'_1 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_1)} |v_{\mathbf{k}}|^2 \quad (90)$$

Ce terme est négligeable, car il est proportionnel à $\langle N \rangle / L^6$ lorsque toutes les positions sont confondues, alors que le terme (I) est en $\langle N \rangle^2 / L^6$.

Supposons maintenant que les positions se groupent par deux : \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 sont proches, de même que \mathbf{r}'_2 et \mathbf{r}'_1 , mais les deux groupes de positions sont mutuellement éloignés. Dans ces conditions, les termes en G_1 au second membre de (87), qui ont une portée microscopique en $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)$ et $(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2)$, deviennent très petits et peuvent être négligés. Reste le produit des fonctions d'onde de paires. Il s'ensuit que la fonction

de corrélation non diagonale est simplement égale au produit des fonctions d'onde de paires relatives aux positions relatives¹².

Dans le cas particulier où $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'_2 = \mathbf{r}'_1 = \mathbf{r}'$, nous obtenons la fonction de corrélation de paires (84), qui obéit à :

$$\left\langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r})\Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r})\Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}')\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \right\rangle_{\mathbf{r}-\mathbf{r}' \rightarrow \infty} \rightarrow |\phi_{\text{paire}}(0)|^2 \quad (91)$$

Cette limite non nulle à grande distance indique l'existence d'un ordre non diagonal concernant l'opérateur densité à deux particules. Comme pour la fonction d'onde de paires, il provient de la contribution (II), c'est-à-dire des termes correspondant au terme d'annihilation-création de paires. La situation rappelle donc ce que nous avons obtenu dans le cas d'un gaz de bosons, lorsqu'il est condensé ; mais, ici, l'ordre non diagonal concerne les paires et non pas les particules individuelles.

3. Discussion physique

Dans un gaz parfait de fermions, comme nous l'avons vu au Complément A_{XVI}, il existe déjà de fortes corrélations entre particules dues à leur seule indiscernabilité (effet de statistique pure). En présence d'interactions attractives, le mécanisme BCS introduit des corrélations supplémentaires (corrélations dynamiques) qui permettent de diminuer l'énergie totale du système. Nous allons voir que cette diminution provient d'un faible déséquilibre entre augmentation d'énergie cinétique et diminution d'énergie potentielle, cette dernière l'emportant légèrement sur la précédente.

Par commodité, nous mènerons cette discussion dans le cadre de l'approximation du potentiel de courte portée (§ 1-c) où tous les éléments de matrice du potentiel d'interaction sont remplacés par une constante $-V$, avec V positif ; tous les $\Delta_{\mathbf{k}}$ sont alors égaux à un même gap Δ .

3-a. Modification de la surface de Fermi et blocage de phase

L'expression de l'énergie écrite en (7) comprend en premier lieu un terme d'énergie cinétique, puis un terme de champ moyen s'exprimant en fonction du nombre moyen de particules ; si ce nombre moyen est constant, il s'agit d'un terme indépendant de l'état quantique du système, et donc insensible au mécanisme d'appariement BCS. En revanche, le dernier terme de (7) est celui qui a été optimisé lors du calcul variationnel, de sorte qu'il est plus intéressant ; nous l'appellerons "terme d'appariement", et utiliserons les mots "énergie potentielle d'appariement" ou encore "énergie de condensation" pour sa valeur optimisée E_{app} . Comme les $u_{\mathbf{k}}$ et les $v_{\mathbf{k}}$ sont réels, E_{app} peut s'écrire :

$$E_{\text{app}} = -V \left[\sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \right]^2 \quad (92)$$

12. Comme mentionné dans la note 8, les variables de centre de masse n'apparaissent pas dans (87) parce que nous avons supposé que toutes les paires sont immobiles. Si elles ne l'étaient pas, la factorisation à grande distance de l'ordre non diagonal ferait apparaître le produit d'une fonction des deux variables $(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2)$ et $(\mathbf{r}'_1 + \mathbf{r}'_2)/2$ par la complexe conjuguée de la même fonction des variables $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ et de $(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ (c'est-à-dire simplement le produit d'une fonction de \mathbf{r}'_1 et \mathbf{r}'_2 par sa complexe conjuguée des variables \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2).

où les $u_{\mathbf{k}}$ et les $v_{\mathbf{k}}$ prennent les valeurs optimisées (27). On voit que, pour obtenir une énergie de condensation importante, il faut que la somme $\sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}$ prenne la plus grande valeur possible.

α. Compromis entre énergies cinétique et potentielle

Dans un gaz parfait, l'état fondamental est celui où tous les états individuels d'énergie inférieure au niveau de Fermi (potentiel chimique $\mu = e_F$) sont occupés par une particule, tous les niveaux supérieurs étant totalement vides. Dans l'espace des \mathbf{k} , les particules occupent chacune un état à l'intérieur d'une des deux sphères de Fermi de rayon k_F (avec $e_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$), celle associée à l'état de spin +, et celle associée à l'état de spin -. Avec le ket (1), un tel état correspond simplement au cas où :

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} = 0 \text{ et } v_{\mathbf{k}} = 1 & \quad \text{pour } k < k_F \\ u_{\mathbf{k}} = 1 \text{ et } v_{\mathbf{k}} = 0 & \quad \text{pour } k > k_F \end{aligned} \quad (\text{gaz parfait}) \quad (93)$$

Comme, quel que soit \mathbf{k} , l'une des deux fonctions $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$ est toujours nulle, le produit $u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}$ l'est également ; l'énergie de condensation d'un système en interaction reste donc nulle tant que l'état du système ne diffère pas de celui d'un gaz parfait. Seule une déformation de la distribution de Fermi permet d'obtenir une énergie de condensation.

Les interactions attractives déforment effectivement cette distribution pour créer un recouvrement entre les régions où les deux fonctions $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$ diffèrent de zéro, comme on peut le voir sur la Figure 1. Ceci permet de minimiser l'énergie d'appariement (92), mais implique un transfert de particules de l'intérieur de la sphère de Fermi vers l'extérieur, donc vers des états d'énergie cinétique supérieure ; il s'ensuit automatiquement un coût en termes d'énergie cinétique. L'optimisation à laquelle nous avons procédé revient à la recherche de l'équilibre le plus favorable entre gain en énergie potentielle et perte en énergie cinétique. L'énergie de condensation est proportionnelle au carré de l'intégrale de la courbe en tiretés de la Figure 1, maximale au voisinage de l'énergie de Fermi e_F ; les plus grandes contributions proviennent donc des énergies proches de e_F , sur une largeur de l'ordre de quelques Δ – mais la figure montre que les contributions à l'énergie de condensation s'étendent relativement loin de la surface de Fermi (la courbe ne décroît que comme l'inverse de la distance en énergie à son maximum). La surface de Fermi, qui était parfaitement nette pour un gaz parfait, devient ainsi floue sur une certaine distance.

La fonction de corrélation à deux particules rend compte plus en détail de cette optimisation de l'énergie potentielle attractive. La relation (64) indique que, pour des spins parallèles, aucune modification notable de la fonction de corrélation ne se produit par rapport au gaz parfait (pour lequel un trou d'échange existe déjà dans la fonction de corrélation binaire) – donc aucune modification importante de l'énergie d'interaction correspondante. Cette absence d'effet provient de ce que la fonction d'onde BCS apparie uniquement des particules de spins opposés. En revanche, pour des directions de spin opposées, la relation (66) indique que la probabilité de présence à deux particules à courte distance est augmentée ; plus la fonction d'onde des paires est grande en module à l'origine ($\mathbf{r} = \mathbf{r}'$), plus cette augmentation est importante. C'est elle qui produit directement le gain d'énergie potentielle attractive.

Ainsi, le gain d'énergie BCS provient du fait que le système change sa fonction d'onde sous l'effet des interactions pour optimiser son énergie potentielle d'apparie-

ment. Pour cela il développe des corrélations qui vont au-delà de celles du gaz parfait ; on parle alors de “corrélations dynamiques”, par opposition aux corrélations statistiques (celles qui découlent uniquement de l’indiscernabilité des particules, comme celles étudiées au Complément A_{XVI}). Il en résulte une déformation de la distribution de Fermi du gaz parfait qui, au lieu de présenter une transition brusque entre les états occupés et les états vides (sphère de Fermi de surface parfaitement nette), présente à sa surface une région de transition plus progressive (sphère de Fermi floue). Le vecteur d’état du système devient alors une superposition d’états où le nombre de particules dans chaque paire d’états $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$ fluctue. Le terme d’énergie potentielle qui pilote le mécanisme BCS est le terme “annihilation-création de paires” calculé au § 3-a- β du Complément B_{XVII} et schématisé sur sa Figure 4. Il fait intervenir une somme des termes contenant les éléments de matrice non diagonaux du potentiel du type :

$$\left\langle n_{(\mathbf{k}, -\mathbf{k})} = 2; n_{(\mathbf{k}'', -\mathbf{k}'')} = 0 \middle| W_2 \middle| n_{(\mathbf{k}, -\mathbf{k})} = 0; n_{(\mathbf{k}'', -\mathbf{k}'')} = 2 \right\rangle \quad (94)$$

(les nombres d’occupation de toutes les autres paires étant inchangés) ; entre le bra et le ket, une paire $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$ est remplacée par une paire $(\mathbf{k}'', -\mathbf{k}'')$. Le gain d’énergie BCS est donc dû à la somme de ces termes non diagonaux ; ils sont sensibles à la cohérence du vecteur d’état entre ces deux composantes où les nombres de paires fluctuent de façon corrélée, et donc à leur phase relative.

β . Blocage de la phase et effets coopératifs

Dans le calcul du § 1-b, nous avons vu que la minimisation de l’énergie conduisait à choisir les phases de tous les $v_{\mathbf{k}}$ égales entre elles, de sorte que ces phases ont simplement disparu de la suite des calculs. Pour discuter le processus physique mis en jeu, il est cependant utile de réintroduire la valeur générale avant optimisation de ces phases, telles qu’elles apparaissent dans (14) ; lorsque tous les éléments de matrice du potentiel d’interaction sont égaux, la valeur moyenne de l’énergie d’appariement s’écrit :

$$E_{\text{app}} = -V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}'} \cos \theta_{\mathbf{k}'} e^{2i(\zeta_{\mathbf{k}'} - \zeta_{\mathbf{k}})} \quad (95)$$

Nous avons remarqué plus haut que, si nous ajoutons à la phase $\zeta_{\mathbf{k}}$ de tous les $v_{\mathbf{k}}$ une même phase quelconque χ , aucun résultat n’est changé. Il existe donc une invariance de l’énergie lors d’une symétrie de la fonction d’onde, celle d’une phase globale des $v_{\mathbf{k}}$; on l’appelle souvent “symétrie $U(1)$ ”, en référence au groupe de symétrie unitaire $U(1)$ des rotations sur un cercle, qui est isomorphe à celui d’un changement de phase complexe.

En revanche, si l’on s’avise de changer une à une les phases des $v_{\mathbf{k}}$, on voit immédiatement que l’énergie d’appariement (95) est réduite (en valeur absolue) : dans le plan complexe, les vecteurs qui s’alignaient parfaitement en étant parallèles entre eux prennent maintenant des directions différentes, de sorte que le module de leur somme est diminué. Or nous avons vu que c’est ce terme qui est à l’origine du gain d’énergie permis par le mécanisme BCS ; il est donc bien lié à l’acquisition d’une phase commune dans toutes les paires d’états individuels. Nous avons ici un exemple du phénomène appelé “brisure spontanée de symétrie” en physique : peu importe la

phase de chacun des $v_{\mathbf{k}}$, qui peut être absolument quelconque, mais il est essentiel que tous prennent la même phase, sinon la plupart du gain d'énergie est perdu. De même, lors de la transition ferromagnétique d'un solide, peu importe la direction de l'espace dans laquelle les spins vont s'orienter, mais il est essentiel qu'elle soit la même¹³ pour tous les spins.

On remarque enfin le caractère coopératif du gain d'énergie ainsi obtenu, qui se manifeste mathématiquement par la présence d'une double somme sur \mathbf{k} et \mathbf{k}' . Si l'on part d'une situation de blocage des phases parfaite, et si l'on détruit le blocage de phase d'une seule paire, on constate que l'énergie perdue est proportionnelle au nombre des autres paires qui sont restées en accord de phase ; ce n'est pas l'énergie individuelle d'une seule paire qui est en jeu. En revanche, si l'on part d'une situation où les phases de toutes les paires sont aléatoires, le changement d'une seule phase $\zeta_{\mathbf{k}}$ ne modifie que peu l'énergie moyenne. Nous sommes donc en présence d'un effet coopératif où la tendance au blocage de chaque phase de paires est d'autant plus forte que les autres paires ont déjà bloqué leur phase propre ; cette tendance provient en quelque sorte d'un champ moyen créé de façon cumulative par toutes les autres paires. Ici aussi, on retrouve l'analogie avec un ferromagnétique, où le gain d'énergie de chaque spin est d'autant plus grand que les autres spins sont déjà parallèles entre eux.

3-b. Gain d'énergie

Calculons le gain d'énergie résultant de la formation des paires. Pour cela, nous reportons dans (7) les relations (27), qui donnent les valeurs optimisées des $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$, et utilisons la définition (25) de $E_{\mathbf{k}}$; nous égalons tous les éléments de matrice du potentiel à une même constante $-V$. Comme alors :

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) = \frac{1}{2} \frac{E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \quad (96)$$

et :

$$u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)^2} = \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \quad (97)$$

nous obtenons :

$$\begin{aligned} & \left\langle \widehat{H} - \mu \widehat{N} \right\rangle_{BCS} \\ &= -\frac{V}{4} \langle N \rangle^2 + \sum_{\mathbf{k}} \left[\xi_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} - \frac{V\Delta^2}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{1}{\sqrt{(\xi_{\mathbf{k}})^2 + \Delta^2}} \frac{1}{\sqrt{(\xi_{\mathbf{k}'})^2 + \Delta^2}} \right] \end{aligned} \quad (98)$$

Le premier terme du second membre est celui de champ moyen (comme plus haut, nous avons négligé 1 devant le nombre total de particules). Le second est celui

13. Pour un ensemble de spins parallèles dans une direction quelconque, chaque spin est dans un état où la phase relative entre les composantes sur $|+\rangle$ et $|-\rangle$ est la même. Pour le mécanisme BCS, c'est la phase entre les composantes où le nombre d'occupation du couple d'états $\mathbf{k}, -\mathbf{k}$ est 0 ou 2 qui prend une valeur indépendante de \mathbf{k} . L'abaissement d'énergie correspondant résulte d'un effet d'interférence entre des états où deux paires \mathbf{k} et \mathbf{k}' ont des nombres d'occupation respectifs $n_{\mathbf{k}} = 2, n_{\mathbf{k}'} = 0$ et $n_{\mathbf{k}} = 0, n_{\mathbf{k}'} = 2$; il ne s'exprime donc pas directement en termes de populations de paires.

d'énergie cinétique, le troisième celui d'interactions entre paires :

$$\frac{-V\Delta^2}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{1}{\sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2}} \frac{1}{\sqrt{(\xi_{k'})^2 + \Delta^2}} = -\frac{\Delta^2}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2}} \quad (99)$$

où, pour obtenir la seconde égalité, nous avons éliminé la somme sur \mathbf{k}' en utilisant la relation (36). Utilisant à nouveau la définition (25) de E_k , nous obtenons :

$$\begin{aligned} & \langle \widehat{H} - \mu \widehat{N} \rangle_{BCS} \\ &= -\frac{V}{4} \langle N \rangle^2 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2}} \left[\xi_k \left(\sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2} - \xi_k \right) - \frac{\Delta^2}{2} \right] \end{aligned} \quad (100)$$

Dans le second membre de cette expression, le premier terme est celui de champ moyen, qui ne présente pas d'intérêt particulier. Le second rend compte de la modification de l'énergie qui résulte des corrélations dynamiques introduites par les interactions ; il est caractéristique du mécanisme BCS.

Vérifions tout d'abord que la somme sur \mathbf{k} qu'il comporte est convergente lorsque Δ est fixé. Ce n'est pas le cas de chacun des termes dans la parenthèse, qui tendent vers une constante lorsque $k \rightarrow \infty$, de sorte que la somme est en $1/\xi_k \sim 1/k^2$, donc divergente. Mais nous allons voir que les termes divergents s'éliminent. En effet :

$$\sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2} - \xi_k \sim \frac{\Delta^2}{2\xi_k} - \frac{3}{8} \frac{\Delta^4}{(\xi_k)^3} + \dots \quad (101)$$

et donc :

$$\frac{1}{\sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2}} \left[\xi_k \left(\sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2} - \xi_k \right) - \frac{\Delta^2}{2} \right] \sim -\frac{3}{8} \frac{\Delta^4}{(\xi_k)^3} + \dots \quad (102)$$

Ainsi les termes divergents de la somme infinie sur \mathbf{k} de (100) s'éliminent-ils entre énergie cinétique et d'interaction ; la fonction à sommer tend vers zéro pour les grands k comme $1/(\xi_k)^3 \sim 1/k^6$, ce qui assure la convergence sans nécessiter l'introduction d'une fréquence de coupure k_c (à part bien sûr celle qui a été nécessaire auparavant pour assurer une valeur finie à Δ). C'était également le cas pour le nombre total de particules ; pour finir, une fois qu'on a introduit une borne supérieure (coupure) k_c dans l'intégrale donnant le gap Δ , toutes les autres quantités physiques importantes restent finies sans nécessiter l'utilisation de cette coupure.

L'évaluation précise de l'énergie nécessite en général le calcul d'intégrales d'une certaine complexité. Le calcul (que nous n'explicitons pas ici) donne :

$$\langle \widehat{H} - \mu \widehat{N} \rangle_{BCS} = \langle \widehat{H} - \mu \widehat{N} \rangle_0 - \frac{V}{4} [\langle N \rangle]^2 - \frac{1}{2} \Delta^2 D_F \quad (103)$$

(où, rappelons-le, D_F est la densité d'états individuels à la surface de la sphère de Fermi, proportionnelle au volume $\mathcal{V} = L^3$). Pour finir, le gain d'énergie que permet l'appariement BCS est :

$$\delta E = -\frac{1}{2} \Delta^2 D_F \quad (104)$$

On peut montrer que les valeurs de ξ_k qui contribuent le plus à l'énergie sont celles qui sont inférieures ou comparables au gap Δ ; le changement d'énergie lié au phénomène d'appariement est donc principalement localisé au voisinage de la surface de Fermi. On interprète souvent ce résultat en considérant qu'un ensemble de $\Delta \times D_F$ paires gagnent chacune une énergie de l'ordre de Δ , ce qui explique la dépendance en Δ^2 de (104) ; cette image a l'avantage de la simplicité, mais garde cependant ses limites (cf. note 13).

3-c. Caractère non perturbatif de la théorie BCS

De façon générale, la façon la plus élémentaire de tenir compte des interactions est d'utiliser une théorie des perturbations du premier ordre (Chapitre XI), où la correction à l'énergie est donnée par la valeur moyenne de l'hamiltonien de perturbation dans l'état initial non perturbé. Ici, la correction d'énergie au premier ordre s'obtient donc en insérant les valeurs (93) dans (7). Le premier terme (énergie cinétique) du second membre de (7) ne change pas, et le troisième reste nul du fait que le produit $u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}$ vaut toujours zéro selon (93), quelle que soit la valeur de \mathbf{k} . Seul subsiste le second terme, qui apporte une correction de champ moyen. A l'ordre suivant en perturbations, l'effet du potentiel modifie l'état fondamental en transférant des paires de particules, toutes deux à l'intérieur de la sphère de Fermi, vers des états individuels dont les impulsions tombent hors de cette sphère (tout en conservant l'impulsion totale) ; ceci modifie à la fois l'énergie cinétique moyenne (qui est augmentée) et l'énergie potentielle d'interaction. Les calculs deviennent de plus en plus compliqués lorsque l'ordre de perturbations augmente. Mais, surtout, il est clair que cette approche par ordres successifs de perturbations ne peut pas rendre compte de l'existence du gap obtenu en (46) : la fonction $\Delta(V)$ ayant toutes ses dérivées par rapport à V nulles en $V = 0$, elle n'est pas développable en série de V .

La théorie BCS fournit un cadre non perturbatif qui résout cette difficulté. Elle n'est cependant pas exacte, puisque c'est une méthode variationnelle, mais la fonction d'onde utilisée est suffisamment bien adaptée pour inclure les effets physiques importants, sans recourir à une quelconque théorie des perturbations.

4. Etats excités

Jusqu'ici, nous n'avons étudié que l'état fondamental du système de fermions attractifs. Dès que la température n'est plus nulle, les états excités du système commencent à être peuplés. Dans cette dernière partie, nous donnons un aperçu des prédictions de la théorie BCS concernant les états excités ; nous renvoyons aux ouvrages spécialisés pour une étude de la théorie BCS à température non nulle.

4-a. Transformation de Bogolubov-Valatin

Les relations (E-3) et (E-4) du Chapitre XVII définissent les transformations de Bogolubov-Valatin des opérateurs de création et d'annihilation de fermions de spin 1/2. Avec les notations de ce complément où les directions des spins restent explicites, elles s'écrivent :

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow} - v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \\ b_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k},\downarrow} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \end{aligned} \quad (105)$$

qui, par conjugaison, donnent les définitions des opérateurs hermitiques conjugués $b_{\mathbf{k}}^\dagger$ et $b_{-\mathbf{k}}^\dagger$:

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k},\downarrow} \\ b_{-\mathbf{k}}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k},\uparrow} \end{aligned} \quad (106)$$

Pour chaque valeur de \mathbf{k} , on obtient ainsi une transformation générale des quatre opérateurs de création et d'annihilation initiaux a ou a^\dagger en quatre nouveaux opérateurs b et b^\dagger . Nous avons montré au Chapitre XVII que ces opérateurs obéissent aux relations d'anticommutation habituelles pour des fermions.

Nous avons également vu dans ce chapitre que le ket $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ défini en (2) :

$$|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = \left[u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right] |0\rangle \quad (107)$$

est vecteur propre des deux opérateurs $b_{\mathbf{k}}$ et $b_{-\mathbf{k}}$ avec la valeur propre nulle :

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}} |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left[a_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger - a_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right] |0\rangle = 0 \\ b_{-\mathbf{k}} |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left[-a_{\mathbf{k},\uparrow} + a_{\mathbf{k},\uparrow} \right] |0\rangle = 0 \end{aligned} \quad (108)$$

Il en découle que le ket variationnel $|\Psi_{BCS}\rangle$ du niveau fondamental, écrit en (1), est vecteur propre de tous les opérateurs $b_{\mathbf{k}}$ et $b_{-\mathbf{k}}$ avec une valeur propre nulle, quel que soit \mathbf{k} . C'est donc aussi un ket propre de tous les opérateurs $b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}$ et $b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}$ de valeur propre nulle, valeur propre minimale pour des opérateurs qui sont définis positifs ou nuls. De plus, nous avons vu que les opérateurs de création $b_{\mathbf{k}}^\dagger$ et $b_{-\mathbf{k}}^\dagger$ permettent, par action répétée, d'obtenir d'autres états, eux aussi vecteurs propres des opérateurs $b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}$ et $b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}$. Nous allons montrer que les opérateurs $b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}$ et $b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}$ peuvent être interprétés comme correspondant aux nombres d'occupation des excitations présentes dans le système physique.

4-b. Paires brisées et paires excitées

Si nous faisons agir $b_{\mathbf{k}}^\dagger$ sur (107), nous obtenons :

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}}^\dagger |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle &= \left[|u_{\mathbf{k}}|^2 a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger - |v_{\mathbf{k}}|^2 a_{-\mathbf{k},\downarrow} a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right] |0\rangle = \left[|u_{\mathbf{k}}|^2 a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger + |v_{\mathbf{k}}|^2 a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \right] |0\rangle \\ &= a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (109)$$

qui est un ket normé à l'unité, évidemment non nul (contrairement à celui qui résulte de l'effet de $b_{\mathbf{k}}$). De même, si nous faisons agir $b_{-\mathbf{k}}^\dagger$, il vient un autre ket non nul :

$$b_{-\mathbf{k}}^\dagger |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = a_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad (110)$$

Ces deux nouveaux kets normés sont orthogonaux au ket de départ $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$, puisqu'ils correspondent à un nombre d'occupation unité, alors que les nombres d'occupation de $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ sont 0 et 2. Pour ces états, une paire a été remplacée par une seule particule n'appartenant à aucune paire; ces états sont dits à "paire brisée".

Les carrés des opérateurs $b_{\mathbf{k}}^\dagger$ et $b_{-\mathbf{k}}^\dagger$ sont nuls, de sorte que l'application répétée de l'un d'entre eux ne permet pas de construire de nouveaux états orthogonaux; mais

c'est possible par leur produit croisé. Faisant agir $b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ sur le ket (110), nous obtenons le ket $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle^e$:

$$|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle^e = b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = \left[u_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}}^* \right] |0\rangle \quad (111)$$

qui est un autre ket normé dont on vérifie aisément l'orthogonalité avec $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ (si l'on fait agir sur $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ les deux opérateurs $b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ et $b_{-\mathbf{k}}^{\dagger}$ dans l'ordre inverse, on obtient le même ket $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle^e$ au signe près). Les composantes des deux états $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ et $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle^e$ contiennent des nombres d'occupation 0 ou 2 ; on nomme $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle^e$ "état de paire excitée". Pour passer de $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ à $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle^e$, il suffit d'invertir $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$, de changer le signe de $v_{\mathbf{k}}$, et enfin de prendre leurs complexes conjugués (c'est vrai dans le cas général, mais dans le cas de l'appariement BCS nous avons trouvé des valeurs réelles des $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$, de sorte que cette dernière opération devient inutile).

4-c. Stationnarité des énergies

Montrons maintenant que les énergies de ces nouveaux états sont stationnaires par rapport aux paramètres variationnels.

$\alpha.$ *Paire brisée*

D'après (109), l'effet de $b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ sur l'état fondamental $|\Psi_{BCS}\rangle$ conduit au ket :

$$b_{\mathbf{k}}^{\dagger} |\Psi_{BCS}\rangle = \left[a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} |0\rangle \right] \otimes |\Psi'_{BCS}\rangle \quad (112)$$

où $|\Psi'_{BCS}\rangle$ est donné par le ket $|\Psi_{BCS}\rangle$ dont la composante de paire \mathbf{k} a été retirée du produit :

$$|\Psi'_{BCS}\rangle = \prod_{\otimes \mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle \quad (113)$$

La valeur moyenne de l'énergie dans l'état (112) est la somme de trois termes :

(i) l'énergie cinétique $e_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ associée à l'état $a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} |0\rangle$

(ii) l'énergie associée à l'état $|\Psi'_{BCS}\rangle$; le calcul de cette énergie est le même que pour $|\Psi_{BCS}\rangle$, avec prise en compte de l'énergie d'interaction entre les paires, à ceci près qu'une paire de moins intervient dans le calcul. Ceci modifie légèrement la valeur de Δ , et donc la valeur optimale des paramètres $\theta_{\mathbf{k}}$; mais, comme la variation relative de Δ est inversement proportionnelle au nombre de particules, nous négligerons cette petite variation.

(iii) enfin l'énergie d'interaction entre la particule dans l'état individuel $a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} |0\rangle$ et celles décrites par $|\Psi'_{BCS}\rangle$; la structure en paires de cet état fait que les seules contributions sont un terme direct en :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}, \nu} V_0 \left\langle a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{\mathbf{k}',\nu}^{\dagger} a_{\mathbf{k}',\nu} a_{\mathbf{k},\uparrow} + a_{\mathbf{k}',\nu}^{\dagger} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{\mathbf{k},\uparrow} a_{\mathbf{k}',\nu} \right\rangle &= V_0 \sum_{\mathbf{k}', \nu} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}', \nu} \rangle \\ &= V_0 N' \end{aligned} \quad (114)$$

(où N' est le nombre moyen de particules dans l'état $|\Psi'_{BCS}\rangle$) et un terme d'échange en :

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} \left\langle a_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}, \uparrow} a_{\mathbf{k}', \uparrow} + a_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}', \uparrow} a_{\mathbf{k}, \uparrow} \right\rangle = - \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}', \uparrow} \rangle \quad (115)$$

Nous retrouvons que, avec une interaction n'agissant pas sur les spins, l'échange n'est possible qu'avec les particules de même spin. Dans l'approximation (29) d'un potentiel à courte portée :

$$V_0 = V_{\mathbf{k}} = -V \quad (116)$$

le terme (114) devient égal à $-VN'$, le terme (115) à $VN'/2$, et la somme des deux termes précédents donne simplement une constante $-VN'/2$.

Les paramètres qui définissent l'état variationnel (113) sont l'ensemble des $\theta_{\mathbf{k}'}$ et $\zeta_{\mathbf{k}'}$ pour $\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}$ (la dépendance en fonction du paramètre $\theta_{\mathbf{k}}$ qui caractérisait la paire brisée a disparu). Ces paramètres rendent l'énergie (ii) stationnaire, puisque nous avons négligé la très faible variation du gap liée à la disparition d'une paire; ils n'interviennent ni dans (i) ni dans (iii).

Nous vérifions ainsi que $b_{\mathbf{k}}^\dagger |\Psi_{BCS}\rangle$ rend l'énergie stationnaire (dans le cadre de l'approximation variationnelle utilisée). Par symétrie, il en est évidemment de même de l'état $b_{-\mathbf{k}}^\dagger |\Psi_{BCS}\rangle$.

β. Paire excitée

Dans les relations de stationnarité (26), le changement de $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ en $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle^e$ conduit simplement à intervertir les signes \pm (les $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$ sont réels); les composantes du ket $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle^e$ font donc partie des solutions que nous avons éliminées en écrivant (27). Nous retrouvons ainsi que la paire excitée correspond bien à une énergie stationnaire; c'est en fait l'énergie la plus élevée possible pour la paire d'états $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$.

4-d. Energies d'excitation

Ainsi, dans l'espace des états à 4 dimensions associé à chaque paire d'états $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$, les opérateurs de création $b_{\mathbf{k}}^\dagger$ permettent effectivement de construire par action sur $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ une nouvelle base de 4 états orthonormés dont les énergies moyennes sont stationnaires. Ils peuvent donc être considérés comme des vecteurs propres approchés de l'hamiltonien du système. Calculons maintenant les valeurs propres correspondantes.

Dans le cas de la paire brisée, l'état excité $|\Psi'_{BCS}\rangle$ ne contient pas le même nombre de particules que $|\Psi_{BCS}\rangle$; il n'y aurait donc aucun sens à comparer directement leurs énergies. Pour effectuer une telle comparaison, il faut tenir compte de la présence d'un réservoir de particules de potentiel chimique μ , défini comme l'augmentation d'énergie du réservoir chaque fois qu'il absorbe une particule. En d'autres termes, il nous faut évaluer les variations de la valeur moyenne $\langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle$.

α. Paire brisée

Montrons que la variation de la valeur moyenne de $\langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle$ associée à la brisure de la paire est simplement l'énergie E_k définie en (25).

Calculons pour cela la variation de cette valeur moyenne lorsque l'état $|\Psi_{BCS}\rangle$ est remplacé par l'expression (112). Plusieurs termes apparaissent :

(i) La variation de la valeur moyenne de l'énergie cinétique est la différence entre l'énergie e_k d'une particule et celle d'une population $|v_{\mathbf{k}}|^2$ de la paire $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$, d'énergie cinétique $2e_k$; cette différence est donc $e_k (1 - 2|v_{\mathbf{k}}|^2)$.

(ii) Pour l'énergie potentielle, le passage de $|\Psi_{BCS}\rangle$ au ket $|\Psi'_{BCS}\rangle$ fait varier le nombre moyen de particules $\langle N \rangle$ de $2|v_{\mathbf{k}}|^2$ (population initiale de la paire) à 0, de sorte que la variation de $\langle N \rangle$ est $\delta \langle N \rangle = -2|v_{\mathbf{k}}|^2$. Le terme de champ moyen $-V \langle N \rangle^2 / 4$ dans (7) varie de $-V \langle N \rangle \delta \langle N \rangle / 2$, soit $V \langle N \rangle |v_{\mathbf{k}}|^2$. Le terme suivant dans (7) est nul pour un potentiel de courte portée. Enfin, la brisure d'une paire participe également à l'énergie de liaison du dernier terme de (7) ; si l'on renomme les indices muets de sommation k en k' et k' en k'' , les termes qui changent sont alors les termes $k = k'$ et les termes $k = k''$, qui se doublent, de sorte que la suppression de la paire augmente l'énergie de :

$$\begin{aligned} 2V u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} &= 2\Delta u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \\ &= \Delta \sqrt{1 - \frac{\xi_k^2}{(E_k)^2}} = \frac{\Delta^2}{E_k} \end{aligned} \quad (117)$$

où nous avons utilisé (31) et (27).

(iii) Nous avons vu plus haut que la particule non appariée possède une énergie potentielle $-V N' / 2 \simeq -V \langle N \rangle / 2$. Cette énergie se regroupe avec le terme de variation du champ moyen calculée ci-dessus pour donner une variation $-V \langle N \rangle (1 - 2|v_{\mathbf{k}}|^2) / 2$. Faisons la somme des contributions précédentes, en leur ajoutant la variation de $-\mu \langle \hat{N} \rangle$ qui introduit un terme $-\mu (1 - 2|v_{\mathbf{k}}|^2)$. La variation totale est alors :

$$\delta \langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle = \left(e_k - \frac{V \langle N \rangle}{2} - \mu \right) (1 - 2|v_{\mathbf{k}}|^2) + \frac{\Delta^2}{E_k} \quad (118)$$

soit, compte tenu de (13) :

$$\begin{aligned} \delta \langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle &= \xi_k \left[1 - \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right) \right] + \frac{\Delta^2}{E_k} \\ &= \frac{\xi_k^2 + \Delta^2}{E_k} = E_k \end{aligned} \quad (119)$$

On trouve ainsi le résultat annoncé¹⁴.

β . Paire excitée

Supposons maintenant que, dans le produit qui donne $|\Psi_{BCS}\rangle$, le ket $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ est remplacé par le ket orthogonal $|\bar{\varphi}'_{\mathbf{k}}\rangle$ écrit en (111), qui décrit une "paire excitée". Nous allons voir que la variation de la valeur moyenne $\langle \hat{H} - \mu \hat{N} \rangle$ associée à cette excitation est le double $2E_k$ de celle associée à la brisure de la paire.

Pour nous en assurer, ici aussi il nous faut ajouter plusieurs variations. La première est relative à l'énergie cinétique, et fournit $2e_k (|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2)$, soit $2e_k (1 - 2|v_{\mathbf{k}}|^2)$ – cf. relation (4). La seconde est celle du champ moyen, induite par le fait que

14. Pour le gaz parfait, le calcul serait le même ; dans le cas particulier où $\Delta = 0$, selon (25) on obtiendrait $E_k = |\xi_k|$.

la valeur moyenne du nombre total de particules varie de $2(|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2)$, ce qui entraîne une variation d'énergie potentielle $-V \langle N \rangle (1 - 2|v_{\mathbf{k}}|^2)$. Il se produit également une variation de l'énergie de liaison entre paires, qui provient du changement de signe du produit $u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}$, ce qui double le terme (117). Du fait du changement du nombre moyen de particules, le terme en $\mu \langle N \rangle$ contribue par $2\mu(|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2)$, soit $2\mu(1 - 2|v_{\mathbf{k}}|^2)$. Au total, tous les termes obtenus pour la paire brisée se doublent, et l'on obtient bien $2E_k$.

γ . *Spectre des excitations élémentaires*

Nous connaissons maintenant les énergies des trois états excités associés à chaque paire d'états : l'énergie E_k (qui est 2 fois dégénérée, puisque associée aux deux kets $b_{\mathbf{k}}^\dagger |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ et $b_{-\mathbf{k}}^\dagger |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$) et l'énergie $2E_k$ (non dégénérée). L'égalité (25) précise la valeur de ces énergies. La Figure 6 montre la courbe représentant la relation de dispersion des excitations élémentaires (énergie de ces excitations en fonction de leur impulsion). Les traits pleins correspondent au spectre associé à la brisure d'une paire $\mathbf{k}, -\mathbf{k}$, dont une particule disparaît, comme dans les relations (109) et (110) ; le spectre associé à l'excitation d'une paire étant simplement obtenu par multiplication par un facteur 2, il n'est pas dessiné. Les traits tiretés représentent ces mêmes énergies pour le gaz parfait (sans interaction) où $\Delta = 0$. On constate que l'effet des interactions est bien de faire apparaître un "gap", c'est-à-dire une valeur minimale Δ de l'énergie d'excitation, alors qu'elle peut s'annuler pour un gaz parfait.

Lors de la brisure d'une paire, nous avons vu que, en moyenne, le changement de population totale du système physique est $1 - 2|v_{\mathbf{k}}|^2$. La courbe de la Figure 6 s'interprète différemment suivant la partie de la courbe à laquelle on s'intéresse. Pour la partie de gauche (fonction décroissante), la courbe en traits pleins se confond presque exactement avec son asymptote en traits tiretés, de sorte que $|v_{\mathbf{k}}|^2$ est pratiquement égal à 1 (cf. Figure 1). Dans ce cas, on a $1 - 2|v_{\mathbf{k}}|^2 \simeq -1$: une particule est supprimée lors de l'excitation, et l'on dit alors que l'excitation est "du type trou". Son énergie μ est celle qu'il faut pour repousser une particule vers le réservoir qui fixe le potentiel chimique, diminuée de l'énergie cinétique e_k dont elle disposait initialement, et à laquelle s'ajoute enfin la correction de champ moyen¹⁵ ; l'énergie d'excitation est donc $\bar{\mu} - e_k$, valeur qui correspond effectivement à l'asymptote à la partie gauche de la courbe. Pour la partie de droite (fonction croissante), la constante $|v_{\mathbf{k}}|^2$ est pratiquement nulle : l'excitation ajoute donc une particule dans le système, et l'on dit alors que l'excitation est "du type particule". Son énergie est celle $e_k - \mu$ qu'il faut pour promouvoir une particule depuis son énergie μ vers un état d'énergie cinétique e_k (avec, comme plus haut, une correction de champ moyen qui change μ en $\bar{\mu}$). Enfin, pour la partie centrale de la courbe, l'excitation est "mixte", à la fois du type trou et particule ; c'est la région du spectre où la courbe en traits pleins s'éloigne le plus de celle en tiretés, et où le mécanisme BCS qui crée le gap Δ joue un rôle essentiel.

A partir de ces quatre niveaux d'énergie associés à chaque paire d'états, la mécanique statistique quantique permet d'obtenir l'opérateur densité décrivant l'équilibre thermique du système à température T , ainsi que les diverses fonctions thermodynamiques. Le calcul correspondant ne sera pas exposé dans ce complément. Nous nous contenterons de mentionner qu'il permet de prolonger la validité d'un certain

15. Cette correction transforme l'énergie initiale e_k en $e_k - V \langle N \rangle / 2$, et donc $\mu - e_k$ en $\bar{\mu} - e_k$.

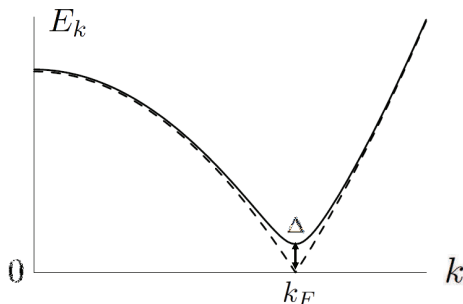


FIGURE 6 – La courbe en trait plein montre les variations en fonction de k de l'énergie d'excitation $E_k = \sqrt{(\xi_k)^2 + \Delta^2}$, avec $\xi_k = e_k - \mu$ et $e_k = \hbar k^2/2m$ (pour simplifier, on a supposé que $\mu \simeq \bar{\mu}$, de sorte que la différence entre $\bar{\mu}$ et μ peut être négligée dans ξ_k). Cette énergie passe par un minimum égal au gap Δ lorsque k est égal au vecteur d'onde de Fermi $k = k_F$ (vecteur d'onde pour lequel $e_k = \mu$). La courbe en traits tiretés représente la même fonction lorsque $\Delta = 0$ (le gap est nul), donc pour un gaz parfait.

La théorie BCS prédit que l'énergie associée à une brisure de paire est E_k , celle associée à une excitation de paire est le double $2E_k$. Le minimum par lequel passe l'énergie E_k est donc le minimum d'énergie qu'il faut fournir au système dans son état fondamental BCS pour produire une des excitations que nous avons calculées. Comme expliqué dans le texte, la région de gauche de la courbe correspond à des excitations "du type trou" (le système physique perd une particule lors de l'excitation) et la région de droite à des excitations "du type particule" (le système physique gagne une particule).

Pour plus de clarté, la figure ne prend pas en compte les effets du champ moyen ; ces derniers abaissent toutes les énergies d'une même quantité négative, et changent le potentiel chimique μ en $\bar{\mu}$ défini en (41), de sorte que ξ_k devient $\xi_k = e_k - \bar{\mu}$. Ces effets décalent simplement un peu vers la gauche la courbe représentant E_k .

nombre des résultats obtenus à $T = 0$, à la simple condition d'introduire un gap $\Delta(T)$ qui dépend de la température. À température nulle, $\Delta(0)$ est toujours donné par (46), mais le gap diminue lorsque T augmente, pour s'annuler à une certaine température critique T_c . Cette annulation correspond à une transition de phase : lorsqu'on refroidit le système de fermions attractifs, à partir d'une certaine température le phénomène de condensation de paires se produit, ce qui entraîne un certain nombre de conséquences physiques. Par exemple, la chaleur spécifique du système commence par prendre des valeurs plus élevées qu'en l'absence de transition, puis tend très rapidement (exponentiellement) vers zéro lorsque $T \rightarrow 0$.

Conclusion

En conclusion de ce complément, le choix d'une base variationnelle d'états appariés apporte un éclairage nouveau sur le comportement d'un ensemble de fer-

mions attractifs. Nous nous sommes concentrés sur le cas des attractions faibles, qui correspond à celui des électrons dans les métaux supraconducteurs ; c'est le cas où $(\Delta/e_F) \ll 1$ et où la relation (75) indique que la taille des paires ξ_{paire} est très grande devant la distance entre fermions. La distribution à une particule de la Figure 1 n'est alors pas très différente de la fonction en marche d'escalier d'un gaz parfait à température nulle, avec cependant un arrondi de la marche sur une petite largeur en énergie Δ . En d'autres termes, l'appariement BCS n'apporte qu'une petite perturbation de la sphère de Fermi du gaz parfait. En étudiant les propriétés de l'état optimal, nous avons pu mettre en évidence un certain nombre de phénomènes importants : apparition de corrélations spatiales dynamiques, donc distinctes de corrélations statistiques, qui expliquent une augmentation de l'énergie moyenne d'attraction (négative) entre fermions de spins opposés ; blocage de phase expliquant l'aspect coopératif de l'appariement (augmentation de l'énergie d'attraction l'emportant sur l'augmentation de l'énergie cinétique et conduisant donc à une diminution de l'énergie totale du système) ; apparition d'une fonction d'onde de paires décrivant des fermions de spins opposés faiblement liés, et rappelant les paires de Cooper (Complément C_{XVII}) ; apparition d'un "gap" dans le spectre des excitations élémentaires expliquant la robustesse de l'état fondamental du système.

Mais on peut aussi s'intéresser à l'autre cas limite, celui où les interactions attractives sont fortes et où la taille des paires devient très petite devant la distance entre particules : on forme alors réellement des molécules dont l'énergie de liaison $-e_L$ est grande (en valeur absolue) devant l'énergie de Fermi e_F . Dire que la dimension de cet état lié est petite devant la distance entre particules revient à dire que la largeur de sa distribution en impulsions est grande devant le vecteur d'onde de Fermi k_F ; les effets du potentiel attractif répartissent alors l'occupation des états individuels sur un très grand nombre d'impulsions différentes, ce qui dilue les effets du principe d'exclusion de Pauli et les rend négligeables (alors que ces effets sont essentiels dans le cas BCS). Au lieu d'être positif, le potentiel chimique est maintenant négatif, proche de $-e_L$; les relations (24) indiquent alors que les θ_k (donc les populations des états individuels \mathbf{k}) restent toujours petits, tout en s'étendant jusqu'à des énergies e_k de l'ordre de e_L . Dans ce cas particulier, la fonction d'onde de paires φ_{paire} , de composantes de Fourier $u_k v_k = \sin \theta_k \cos \theta_k e^{2i\zeta_k}$, coïncide pratiquement avec la fonction d'onde de composantes de Fourier $(v_k/u_k) = \text{tg} \theta_k e^{2i\zeta_k}$ qui a servi à construire initialement l'état apparié. Les molécules étant formées de deux fermions fortement liés, elles se comportent comme des bosons composites (Complément A_{XVII}, § 3), susceptibles de présenter le phénomène de condensation de Bose-Einstein pour des bosons. L'intérêt des états appariés est qu'ils permettent de voir comment l'on peut passer continûment d'un cas limite (situation BCS de sphère de Fermi faiblement perturbée) à l'autre (condensation de molécules fortement liées). Une discussion détaillée de ce passage continu et de ses effets physiques est donnée dans le § 4.6 de la référence [10] et dans [11].

Dans ce complément, nous avons discuté l'interprétation physique des résultats de calculs, qui ont été exposés en détail ; ceci fournit au lecteur les bases nécessaires à une étude des manifestations expérimentales de la supraconductivité, dont l'exposé dépasse le cadre de cet ouvrage. Parmi les aspects qui n'ont pas été abordés dans ce complément, on peut citer : phénomènes de transport et explication de l'annulation de la résistivité électrique ; comportement en présence d'un champ magnétique (effet Meissner-Ochsenfeld) ; étude expérimentale du spectre des excitations élémentaires

et mesure du gap au moyen de diverses méthodes (effet tunnel, résonance magnétique); effet Josephson. Le lecteur intéressé pourra consulter par exemple l'ouvrage de M. Tinkham [12], de R.D. Parks [13], ou encore celui de A.J. Leggett déjà cité [8]; celui de M. Combescot et S.Y. Shiau [14] donne un bon aperçu général des quatre principales méthodes théoriques qui permettent l'étude de la superconductivité, la méthode BCS variationnelle que nous avons exposée dans ce complément constituant la première d'entre elles.

Complément D_{XVII}

Paires de Cooper

1	Le modèle de Cooper	355
2	Vecteur d'état et hamiltonien	355
3	Solution de l'équation aux valeurs propres	357
4	Calcul de l'énergie de liaison dans un cas simple . . .	357

Nous présentons dans ce complément un modèle qui permet de discuter plus en détail certains aspects physiques de la théorie BCS, tout en s'affranchissant des difficultés inhérentes à la discussion des propriétés physiques d'un système à N corps. Il s'agit du "modèle de Cooper", où l'on étudie les propriétés de deux fermions attractifs dont la fonction d'onde en représentation impulsion est exclue de l'intérieur d'une sphère de Fermi. Nous le présentons au § 1, ce qui nous permettra de montrer l'existence d'un état lié qui n'existerait pas en l'absence de cette sphère ; nous verrons de plus que l'expression mathématique de l'énergie de liaison correspondante rappelle la valeur du gap Δ obtenu dans le cadre de la théorie BCS.

1. Le modèle de Cooper

Au sein d'un grand ensemble de fermions identiques, isolons par l'esprit deux fermions attractifs afin d'étudier leur fonction d'onde à deux corps et niveaux d'énergie ; la présence de tous les autres fermions est simplement prise en compte par une sphère de Fermi qui, à cause du principe d'exclusion de Pauli, impose l'annulation des composantes de cette fonction d'onde à l'intérieur de la sphère. Une telle approche reste bien sûr assez peu rigoureuse : il n'y a pas grand sens à isoler ainsi deux fermions parmi un grand nombre d'autres dont ils sont totalement indiscernables. De plus, on comprend mal pourquoi deux d'entre eux interagiraient par un potentiel attractif, alors que tous les autres qui déterminent la sphère de Fermi d'un gaz sont sans interaction. Cependant, il se trouve que la forme mathématique des résultats auxquels conduit ce modèle présente des similarités intéressantes avec ceux d'une approche variationnelle où l'on traite tous les fermions sur le même plan. Il est donc utile de l'étudier.

2. Vecteur d'état et hamiltonien

Considérons deux fermions attractifs dans un état de spin singulet $|S = 0\rangle$:

$$|S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1 : \uparrow\rangle |2 : \downarrow\rangle - |1 : \downarrow\rangle |2 : \uparrow\rangle] \quad (1)$$

Le mouvement relatif de leurs variables de position est décrit par le ket orbital $|\Psi_{\text{orb}}\rangle$, et leur centre de masse est décrit par un ket $|\Phi_{\mathbf{K}=0}\rangle$ d'impulsion nulle. Leur vecteur

d'état est alors :

$$|\Psi\rangle = |\Phi_{\mathbf{K}=0}\rangle \otimes |\Psi_{\text{orb}}\rangle \otimes |S=0\rangle \quad (2)$$

L'état $|\Psi_{\text{orb}}\rangle$ est caractérisé par une fonction d'onde $\Psi_{\text{orb}}(\mathbf{r})$:

$$\Psi_{\text{orb}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \Psi_{\text{orb}} \rangle \quad (3)$$

où :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (4)$$

est la différence des positions des deux particules (position relative). Comme l'état singulet est impair par échange des deux particules, leur caractère fermionique impose que la fonction d'onde $\Psi_{\text{orb}}(\mathbf{r})$ soit paire par échange des particules, donc par changement du signe de \mathbf{r} :

$$\Psi_{\text{orb}}(-\mathbf{r}) = \Psi_{\text{orb}}(\mathbf{r}) \quad (5)$$

Nous supposons que l'opérateur décrivant l'interaction attractive entre les deux particules est indépendant du spin. Comme dans le § B.2 du Chapitre VII, nous séparons dans l'hamiltonien H des deux particules le mouvement du centre de masse du mouvement relatif, et nous supposons que le centre de masse est immobile. Il reste alors un hamiltonien H_{rel} qui n'agit que dans l'espace des variables du mouvement relatif, et qui s'écrit :

$$H_{\text{rel}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} + V(\hat{\mathbf{r}}) \quad (6)$$

où $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2$ est l'opérateur associé à la position relative des deux particules ; $\hat{\mathbf{p}}$ est l'opérateur associé à l'impulsion du mouvement relatif, défini en fonction des impulsions $\hat{\mathbf{p}}_1$ et $\hat{\mathbf{p}}_2$ des deux particules par :

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1 - \hat{\mathbf{p}}_2}{2} \quad (7)$$

Comme mentionné plus haut, nous supposons la présence d'un ensemble de fermions sans interaction dont le niveau de Fermi est e_F . Nous allons donc résoudre l'équation aux valeurs propres :

$$H_{\text{rel}} |\Psi_{\text{orb}}\rangle = (E + 2e_F) |\Psi_{\text{orb}}\rangle \quad (8)$$

lorsque $|\Psi_{\text{orb}}\rangle$ n'a aucune composante à l'intérieur de la sphère de Fermi de rayon k_F lié au niveau de Fermi e_F par :

$$e_F = \frac{\hbar^2 (k_F)^2}{2m} \quad (9)$$

Dans (8), E est l'énergie propre ramenée au double de l'énergie de Fermi. Il est en effet commode de prendre $2e_F$ comme référence ; ce serait en effet, en l'absence d'interaction entre les deux fermions étudiés, l'énergie minimale qu'il faudrait leur conférer pour que $|\Psi_{\text{orb}}\rangle$ n'ait de composante qu'à l'extérieur de la sphère de Fermi. Avec cette convention sur l'origine des énergies, E traduit donc uniquement l'effet des interactions attractives.

3. Solution de l'équation aux valeurs propres

Décomposons alors $|\Psi_{\text{orb}}\rangle$ sur les vecteurs propres $|\mathbf{k}\rangle$ normés de l'impulsion \mathbf{P} (ondes planes) selon :

$$|\Psi_{\text{orb}}\rangle = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \quad (10)$$

Projetée sur $|\mathbf{k}\rangle$, l'équation aux valeurs propres (8) devient :

$$\left(2e_k g_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k} | \widehat{V} | \mathbf{k}' \rangle g_{\mathbf{k}'} \right) = (E + 2e_F) g_{\mathbf{k}} \quad (11)$$

où nous avons posé, comme habituellement :

$$e_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (12)$$

L'absence de composante de $|\Psi_{\text{orb}}\rangle$ dans la sphère de Fermi se traduit alors par la relation :

$$g_{\mathbf{k}} = 0 \quad \text{si } k \leq k_F \quad (13)$$

tandis que (11) devient :

$$[E + 2(e_F - e_k)] g_{\mathbf{k}} = \sum_{|\mathbf{k}'| > k_F} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \quad (14)$$

Nous avons noté $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ les éléments de matrice de l'opérateur d'interaction \widehat{V} :

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \langle \mathbf{k} | \widehat{V} | \mathbf{k}' \rangle \quad (15)$$

4. Calcul de l'énergie de liaison dans un cas simple

Simplifions encore le modèle en supposant maintenant que les éléments de matrice $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ du potentiel d'interaction sont tels que :

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} &= -V \quad \text{si } |\mathbf{k}|, |\mathbf{k}'| \leq k_F + \Delta k \\ V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} &= 0 \quad \text{sinon} \end{aligned} \quad (16)$$

où Δk définit un domaine de vecteurs d'onde $\Delta k \ll k_F$; ces éléments de matrice sont donc factorisés. Par commodité, nous avons introduit un signe moins devant la constante V afin que, le potentiel étant attractif, la constante V soit positive. Lorsque $|\mathbf{k}| \leq k_F + \Delta k$, la somme du membre de droite (14) devient une constante $-SV$ indépendante de \mathbf{k} , avec :

$$S = \sum_{k_F < |\mathbf{k}'| \leq k_F + \Delta k} g_{\mathbf{k}'} \quad (17)$$

tandis que, si $|\mathbf{k}| > k_F + \Delta k$, cette somme est nulle. La solution de cette équation est alors simplement :

$$g_{\mathbf{k}} = \frac{-SV}{E + 2(e_F - e_k)} \quad \text{si } k_F < |\mathbf{k}| \leq k_F + \Delta k$$

$$g_{\mathbf{k}} = 0 \quad \text{sinon} \quad (18)$$

Il faut y ajouter une condition de cohérence qui découle du report de cette solution dans la définition (17) de S :

$$S = \sum_{k_F < |\mathbf{k}'| \leq k_F + \Delta k} \frac{-SV}{E + 2(e_F - e_{k'})} \quad (19)$$

soit, en changeant le signe du dénominateur :

$$\frac{1}{V} = \sum_{k_F < |\mathbf{k}'| \leq k_F + \Delta k} \frac{1}{2(e_{k'} - e_F) - E} \quad (20)$$

Cette condition constitue également une équation implicite qui permet d'obtenir l'énergie E . Si nous supposons le système contenu dans une boîte cubique de côté L très grand, nous pouvons transformer la somme discrète en une intégrale, et nous obtenons :

$$\frac{1}{V} = \frac{L^3}{2\pi^2} \int_{k_F}^{k_F + \Delta k} \frac{k^2 dk}{2(e_k - e_F) - E} \quad (21)$$

Prenons alors comme variable d'intégration la variable x :

$$x = e_k - e_F \quad (22)$$

Comme $de_k = \hbar^2 k dk / m$, il s'introduit alors dans l'intégrale une densité d'états $D(e_k)$:

$$D(e_k) = \frac{L^3}{2\pi^2} k^2 \frac{dk}{de_k} = \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{m}{\hbar^2} k \quad (23)$$

soit :

$$D(e_k) = \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{m}{\hbar^3} \sqrt{2me_k} \quad (24)$$

L'équation implicite en E devient alors :

$$\frac{1}{V} = \int_0^{\Delta e} dx \frac{D(e_F + x)}{2x - E} \quad (25)$$

où la borne supérieure Δe est définie par :

$$e_F + \Delta e = \frac{\hbar^2}{2m} (k + \Delta k)^2 \quad (26)$$

Comme nous avons supposé $\Delta k \ll k_F$, dans (25) nous pouvons remplacer¹ la densité d'états $D(e_F + x)$ par $D(e_F)$, indépendante de la variable x , dont nous simplifions la notation en D_F :

$$D_F = D(e_F) \tag{27}$$

L'intégration est alors possible et conduit à :

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} &= \frac{D_F}{2} \{ \text{Log}(2x - E) \}_0^{\Delta e} = \frac{D_F}{2} \text{Log} \left[\frac{2\Delta e - E}{-E} \right] \\ &= -\frac{D_F}{2} \text{Log} \left[\frac{-E}{2\Delta e - E} \right] \end{aligned} \tag{28}$$

Nous avons donc :

$$\frac{-E}{2\Delta e - E} = e^{-2/VD_F} \tag{29}$$

La solution de cette équation en E est :

$$E = -2\Delta e \frac{e^{-2/VD_F}}{1 - e^{-2/VD_F}} \tag{30}$$

qui, lorsque $VD(e_F) \ll 1$, se simplifie en :

$$E = -2\Delta e \exp[-2/VD_F] \tag{31}$$

Nous obtenons donc une énergie négative (par rapport à $2e_F$), comme on s'y attend pour un état lié (la fonction d'onde est normalisable). La fonction $\exp(-1/x)$ n'étant pas développable en série au voisinage de $x = 0$, cette énergie varie selon une fonction qui n'est pas exprimable comme une série de puissances successives du potentiel d'interaction V , puisque toutes ses dérivées sont nulles en $x = 0$; il en découle que sa valeur ne peut pas être obtenue dans le cadre d'un calcul de perturbations habituel.

On remarque également que l'énergie E tend vers zéro (par valeurs négatives) si la densité d'états $D(e_F)$ tend vers zéro, donc si e_F tend vers zéro : la présence de l'état lié est donc bien liée à celle de la sphère de Fermi dont nous avons supposé l'existence, et dont le rôle ici est d'introduire une densité d'états non nulle. Si la sphère de Fermi disparaît, l'état lié disparaît également.

Nous retrouvons ainsi des résultats qui rappellent ceux obtenus au Complément C_{XVII} dans le cadre de la théorie BCS, en particulier l'expression (46) de ce complément qui donne le gap Δ . Pour obtenir cette expression, nous avons introduit une borne supérieure $\hbar\omega_D$ aux variations (en module) des énergies autour de l'énergie de Fermi ; cette borne joue donc un rôle semblable à l'énergie Δe introduite en (26). Il suffit alors de supposer que $\hbar\omega_D = \Delta e$ pour que les deux résultats deviennent très semblables, puisqu'ils ne diffèrent alors plus que par un facteur 2 dans l'exposant (la différence de signe provient simplement de ce que le gap Δ a été défini positif, alors qu'une énergie de liaison est négative). L'intérêt du modèle de Cooper est de mettre en lumière simplement le rôle essentiel de la densité d'états D_F au voisinage du niveau de Fermi dans la constitution du gap Δ de la théorie BCS.

1. En remplaçant k par k_F dans (23), on peut facilement calculer un ordre de grandeur de la densité d'états au niveau de Fermi. On trouve $D(e_F) \sim \langle N \rangle / e_F$, donc une valeur proportionnelle au nombre moyen de particules.

Complément E_{XVII}

Bosons répulsifs condensés

1	Etat variationnel, énergie	363
1-a	Etat variationnel	363
1-b	Energie totale	364
1-c	Approximation où $N_0 \gg N_e$	365
2	Optimisation	365
2-a	Conditions de stationnarité	366
2-a- α	Stationnarité par rapport aux phases : blocage des phases	366
2-a- β	Stationnarité par rapport aux $\theta_{\mathbf{k}}$	366
2-a- γ	Stationnarité par rapport à N_0	367
2-b	Solution des équations	367
3	Propriétés de l'état fondamental	368
3-a	Nombre de particules, déplétion quantique	368
3-b	Energie	370
3-b- α	Energie cinétique	370
3-b- β	Interaction avec le condensat	371
3-b- γ	Energie totale du fondamental	372
3-c	Blocage des phases ; comparaison avec le mécanisme BCS	372
3-d	Fonctions de corrélation	374
3-d- α	Une particule	374
3-d- β	Deux particules	376
4	Méthode opératorielle de Bogolubov	379
4-a	Espace variationnel, restriction de l'hamiltonien	379
4-b	Hamiltonien de Bogolubov	381
4-c	Construction d'une base d'états excités, quasi-particules	382

Ce complément est consacré à l'étude des propriétés d'un ensemble de bosons interagissant entre eux de façon répulsive¹ et présentant le phénomène de condensation de Bose-Einstein. Pour un gaz parfait, nous savons en effet qu'un système de bosons dans son état fondamental est totalement condensé : un seul état quantique individuel, celui de plus basse énergie, est occupé par l'ensemble des particules. Lorsque les interactions sont de courte portée et que le système est suffisamment dilué, on s'attend à ce que ses propriétés restent proches de celles du gaz parfait, en particulier à ce qu'une fraction importante des particules occupe encore le même état quantique individuel. Nous allons donc supposer que le système se trouve effectivement dans ce cas, et que la population d'un état quantique individuel dépasse largement toutes les autres. Nous supposerons que chacun de ces états obéit aux

1. La raison pour laquelle nous n'envisagerons pas le cas des interactions attractives est qu'elles conduisent à un système physique instable – cf. § 4-b du Complément H_{XV}.

conditions aux limites périodiques dans une boîte de côté L (Complément C_{XIV}), et que l'état de grande population² est l'état $\mathbf{k} = 0$ (d'impulsion $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ et d'énergie cinétique nulles). Donc, si N_0 est la valeur moyenne de la population de ce niveau d'impulsion nulle, nous supposons que :

$$N_0 \gg n_{\mathbf{k}} \quad (\text{quel que soit } \mathbf{k} \neq 0) \quad (1)$$

où $n_{\mathbf{k}} = \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle$ est le nombre moyen de particules occupant un état individuel $\mathbf{k} \neq 0$. Le nombre total N de particules est :

$$N = N_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} n_{\mathbf{k}} \quad (2)$$

Dans le Complément C_{XV}, nous avons utilisé une première approximation pour étudier l'état fondamental d'un système de bosons condensés : celle où l'état du système de N particules est écrit comme le produit de N vecteurs d'état individuels identiques. Ceci nous a conduits à l'équation de Gross-Pitaevskii. Cette approche implique qu'un seul état individuel $\mathbf{k} = 0$ est peuplé ($N_0 = N$ et $n_{\mathbf{k}} = 0$ pour tout \mathbf{k}), comme pour un gaz parfait. Mais ceci ne peut évidemment pas être exact : il est clair que les interactions introduisent des corrélations dynamiques entre les particules, ce dont ne peut pas rendre compte un vecteur d'état qui est le simple produit de kets individuels (donc sans corrélations). En réalité, l'effet du potentiel sur l'état fondamental est de transférer au moins une fraction des particules³ de l'état $\mathbf{k} = 0$ vers des états $\mathbf{k} \neq 0$; un modèle ne faisant intervenir qu'un seul état individuel est nécessairement limité au cas où les effets du potentiel sont très faibles de sorte que $N_0 \simeq N$.

Dans le Complément E_{XV}, nous avons introduit une autre approximation, basée sur la méthode de Hartree-Fock ; elle est plus générale que la précédente puisqu'elle permet de prendre en compte une température non nulle. Cependant, elle suppose à nouveau que chaque particule se déplace dans le champ moyen créé par toutes les autres, sans inclure les corrélations dynamiques ; la description de l'état fondamental n'est donc pas meilleure que celle de l'équation de Gross-Pitaevskii. De plus, elle présente une difficulté pour un système de bosons présentant la condensation de Bose-Einstein : nous avons noté au § 3-b- β du Complément G_{XV} (remarque ii) que, pour un système de bosons condensés, l'approximation de Hartree-Fock prévoit dans l'équilibre grand-canonique des fluctuations très importantes du nombre de particules condensées. Or, dans la réalité, ces fluctuations sont fortement limitées par les répulsions entre particules, ce qui indique bien que les prédictions de l'approximation de Hartree-Fock sont non physiques en ce qui concerne ces fluctuations.

Dans le présent complément, nous nous donnons comme objectif de remédier à ces deux défauts : d'une part, nous tiendrons compte de corrélations dynamiques introduites dans le système physique par les interactions ; d'autre part, nous ne laisserons pas fluctuer arbitrairement le nombre de particules condensées. Nous utiliserons une méthode variationnelle, en choisissant un état variationnel qui prend

2. Cette hypothèse simplifie l'écriture des équations, mais n'est pas essentielle ; pour traiter le cas où c'est un état d'impulsion \mathbf{k}_0 non nulle qui est fortement peuplé, on peut passer dans le référentiel galiléen où cette impulsion s'annule. Dans le référentiel initial, cela revient simplement à ajouter \mathbf{k}_0 à tous les vecteurs d'onde qui figurent dans les équations.

3. Ce phénomène porte traditionnellement le nom de "déplétion quantique" ; nous y reviendrons plus en détail au § 3-a.

en compte des corrélations binaires entre particules, sans pour autant introduire de fluctuations parasites du nombre des particules. L'état variationnel sera construit à partir d'un état apparié, ce qui nous permettra d'utiliser directement les résultats du Chapitre XVII; nous lui ajouterons cependant une composante pour tenir compte de la condensation de Bose-Einstein dans l'état individuel $\mathbf{k} = 0$. Bien sûr, il ne s'agit toujours pas d'un calcul exact, puisqu'il repose sur une approximation variationnelle, mais il permet d'inclure une physique plus riche que la simple approximation de Gross-Pitaevskii. Cette approche permet de bien mettre en lumière les nombreuses analogies entre appariement de bosons condensés et de fermions, mais aussi les différences.

De façon générale, ce complément illustre l'intérêt des méthodes variationnelles permettant de faire varier les corrélations entre paires de particules. Lorsque les interactions sont binaires, comme dans un hamiltonien standard, ce sont ces corrélations qui déterminent la valeur moyenne de l'énergie potentielle (Chapitre XV, § C-5-b- α). Les corrélations ternaires, etc. sont certes présentes dans le système, et peuvent parfaitement y jouer un rôle; mais elles n'interviennent pas directement dans l'énergie. Ceci explique pourquoi l'optimisation des seules corrélations binaires par des états appariés peut déjà conduire à des résultats de bonne qualité.

Dans le § 1, nous introduisons l'état variationnel apparié dépendant d'un certain nombre de paramètres, et calculons l'énergie moyenne associée. Dans le § 2, nous recherchons les valeurs optimales de ces paramètres qui minimisent cette énergie, en utilisant une approximation où $N_0 \simeq N$ de sorte que les interactions entre particules dans les états individuels $\mathbf{k} \neq 0$ peuvent être négligées. Le § 3 est consacré à l'étude des propriétés physiques de l'état ainsi obtenu, nombre de particules hors de l'état $\mathbf{k} = 0$, énergie, et fonctions de corrélation. Nous exposons ensuite au § 4 un point de vue différent, celui de la méthode opératorielle de Bogolubov. Nous choisirons un espace variationnel plus grand, et utiliserons les résultats du § E du Chapitre XVII afin de faire apparaître l'hamiltonien de Bogolubov, directement diagonalisable. Ceci nous permettra de retrouver un certain nombre de résultats obtenus précédemment. Ce § 4 étant relativement indépendant des précédents, le lecteur intéressé uniquement par la méthode opératorielle de Bogolubov pourra y aller directement. La conclusion du complément résumera les acquis et les limites de la méthode d'approximation utilisée.

1. Etat variationnel, énergie

Nous appliquons directement les résultats du Complément B_{XVII}, tant en ce qui concerne le choix du ket variationnel que pour le calcul de son énergie moyenne.

1-a. Etat variationnel

Nous choisissons donc le vecteur d'état variationnel (normé) sous la forme :

$$|\Phi_B\rangle = |\varphi_0\rangle \otimes |\Psi_{\text{app}}\rangle = |\varphi_0\rangle \otimes \prod_{\otimes \mathbf{k} \in D} |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle \quad (3)$$

où la notation B fait référence au nom de Bogolubov. Dans cette expression, $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ est l'état apparié pour des particules sans spin écrit en (B-8) dans le Chapitre XVII,

produit tensoriel des états normés (C-13) :

$$|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\text{ch}\theta_{\mathbf{k}}} \exp \left[-x_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right] |0\rangle \quad (4)$$

avec :

$$x_{\mathbf{k}} = \text{th}\theta_{\mathbf{k}} e^{2i\zeta_{\mathbf{k}}} \quad (\theta_{\mathbf{k}} \geq 0) \quad (5)$$

Le domaine D du produit tensoriel dans (3) désigne un demi-domaine de l'espace des \mathbf{k} afin d'éviter (comme nous l'avons vu dans le Chapitre XVII) une double apparition de chaque état $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = |\bar{\varphi}_{-\mathbf{k}}\rangle$; l'origine $\mathbf{k} = 0$ est exclue de D .

Pour $|\varphi_0\rangle$, c'est l'état cohérent dont l'expression peut par exemple être trouvée dans le Complément G_V; la relation (65) de ce complément s'écrit :

$$|\varphi_0\rangle = e^{-N_0/2} e^{\alpha_0 a_0^{\dagger}} |n_0 = 0\rangle \quad (6)$$

Cet état dépend d'un paramètre complexe α_0 , que nous caractérisons par son module $\sqrt{N_0}$ et de sa phase ζ_0 :

$$\alpha_0 = \sqrt{N_0} e^{i\zeta_0} \quad (7)$$

C'est le vecteur propre normé de l'opérateur a_0 de valeur propre α_0 :

$$a_0 |\varphi_0\rangle = \alpha_0 |\varphi_0\rangle \quad (8)$$

Le nombre moyen de particules dans l'état $\mathbf{k} = 0$ est donc :

$$\langle \varphi_0 | a_0^{\dagger} a_0 | \varphi_0 \rangle = \alpha_0^* \alpha_0 \langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = N_0 \quad (9)$$

Nous avons également vu au Complément G_V que la largeur de la distribution correspondante est $\sqrt{N_0}$, donc négligeable devant N_0 (nous supposons que ce nombre est grand).

Les variables variationnelles contenues dans le ket d'essai (3) sont donc l'ensemble des $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$, ainsi que N_0 et ζ_0 .

1-b. Énergie totale

L'expression (61) du Complément B_{XVII} fournit l'énergie totale sous la forme :

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_B &= \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e_{\mathbf{k}} \text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} + \frac{V_0}{2} (N_0 + N_e)^2 \\ &+ N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} [\text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} - \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} \cos 2(\zeta_0 - \zeta_{\mathbf{k}})] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \neq 0} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} [\text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} \text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}'} + \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{sh}\theta_{\mathbf{k}'} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}'} \cos 2(\zeta_{\mathbf{k}} - \zeta_{\mathbf{k}'})] \end{aligned} \quad (10)$$

où les éléments de matrice $V_{\mathbf{k}}$ du potentiel d'interaction entre les particules sont définis comme dans le Chapitre XVII par :

$$V_{\mathbf{k}} = \frac{1}{L^3} \int d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} W_2(\mathbf{r}) \quad (11)$$

Le terme de la seconde ligne de (10) traduit l'effet des échanges d'impulsion entre particules $\mathbf{k} \neq 0$ avec le condensat $\mathbf{k} = 0$, ainsi que l'effet des processus d'annihilation-création de paires à partir du condensat. Les termes de la dernière ligne avec une double somme sur \mathbf{k} et \mathbf{k}' correspondent à l'effet des interactions entre particules dans des états $\mathbf{k} \neq 0$.

1-c. Approximation où $N_0 \gg N_e$

Comme nous l'avons rappelé dans l'introduction, seul un état individuel est peuplé pour un gaz parfait dans son niveau fondamental, l'état de plus basse énergie ; dans ce cas particulier le nombre moyen total de particules est donc égal à N_0 , toutes les populations $n_{\mathbf{k}}$ des autres états \mathbf{k} étant nulles. Nous allons supposer que le système physique étudié est un gaz dilué où les effets des interactions restent modérés, de sorte que N_0 reste très supérieur à la somme de toutes les populations $n_{\mathbf{k}}$:

$$N_0 \gg N_e = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} n_{\mathbf{k}} \tag{12}$$

Cette hypothèse est plus forte que celle faite initialement en (1), puisque la population N_0 doit largement excéder la somme de toutes les autres populations. Elle permet cependant de simplifier les calculs qui vont suivre tout en dégageant un certain nombre d'idées physiques générales.

Dans ces conditions, les interactions entre particules dans des états $\mathbf{k} \neq 0$ et particules dans le condensat $\mathbf{k} = 0$ sont dominantes par rapport à celles entre particules toutes deux dans des états $\mathbf{k} \neq 0$. Le terme d'interaction de la seconde ligne de (10), qui est proportionnel à N_0 , doit donc être bien plus grand que celui de la troisième ligne, qui ne contient pas N_0 . C'est pourquoi nous allons utiliser la valeur moyenne approchée :

$$\begin{aligned} \langle \widehat{H} \rangle_B &\simeq \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e_{\mathbf{k}} \operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} + \frac{V_0}{2} (N_0 + N_e)^2 \\ &+ N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} [\operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} - \operatorname{sh} \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{ch} \theta_{\mathbf{k}} \cos 2(\zeta_0 - \zeta_{\mathbf{k}})] \end{aligned} \tag{13}$$

Il nous faut maintenant déterminer les valeurs optimales des variables apparaissant dans (13) en minimisant cette valeur moyenne de l'énergie par rapport à chacune d'entre elles.

2. Optimisation

Les variables dont dépend l'état variationnel $|\Phi_B\rangle$ sont N_0 et ζ_0 associées à l'état individuel $\mathbf{k} = 0$ (condensat), ainsi que les angles $\theta_{\mathbf{k}}$ et les phases $\zeta_{\mathbf{k}}$ associées à tous les autres états $\mathbf{k} \neq 0$. En revanche, N_e n'est pas une variable variationnelle, mais une fonction de ces variables déterminée par la relation (53) du Complément B_{XVII} :

$$N_e = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} \tag{14}$$

Comme dans le Complément B_{XVII}, nous allons introduire un multiplicateur de Lagrange μ (potentiel chimique, cf. Appendice VI) destiné à fixer la valeur moyenne du nombre total de particules ; nous imposerons la stationnarité de la différence de deux valeurs moyennes :

$$A = \langle \widehat{H} \rangle_B - \mu \langle \widehat{N} \rangle_B \quad (15)$$

où $\langle \widehat{N} \rangle_B$ est le nombre moyen total de particules dans l'état variationnel :

$$\langle \widehat{N} \rangle_B = \langle a_0^\dagger a_0 \rangle + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle = N_0 + N_e \quad (16)$$

La fonction à rendre minimale est alors :

$$A = \frac{V_0}{2} (N_0 + N_e)^2 - \mu N_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (e_{\mathbf{k}} - \mu) \operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} + N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} F_{\mathbf{k}} \quad (17)$$

avec :

$$F_{\mathbf{k}} = V_{\mathbf{k}} [\operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} - \operatorname{sh} \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{ch} \theta_{\mathbf{k}} \cos 2(\zeta_0 - \zeta_{\mathbf{k}})] \quad (18)$$

2-a. Conditions de stationnarité

Nous devons rendre stationnaire la fonction A par rapport à toutes les variables. Nous commencerons par les phases, puis les paramètres $\theta_{\mathbf{k}}$, puis N_0 .

$\alpha.$ Stationnarité par rapport aux phases : blocage des phases

Les phases n'interviennent que dans les $F_{\mathbf{k}}$, sous forme de différences de phases $\zeta_0 - \zeta_{\mathbf{k}}$. Le potentiel étant répulsif, nous supposons que $V_{\mathbf{k}}$ est positif ; de plus, la variable $\theta_{\mathbf{k}}$ étant toujours positive selon sa définition dans le Chapitre XVII, le produit $\operatorname{sh} \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{ch} \theta_{\mathbf{k}}$ est également toujours positif. L'expression (18) montre ainsi que, quel que soit $\theta_{\mathbf{k}}$, la minimisation de la fonction A par rapport aux phases ζ_0 et $\zeta_{\mathbf{k}}$ demande que le cosinus soit égal à 1, donc que :

$$\zeta_{\mathbf{k}} = \zeta_0 \quad \text{pour tout } \mathbf{k} \quad (19)$$

Les phases servant à construire les états appariés doivent donc être égales à celle qui définit l'état cohérent associé à $\mathbf{k} = 0$. Nous appellerons cette égalité "*condition de blocage des phases*".

$\beta.$ Stationnarité par rapport aux $\theta_{\mathbf{k}}$

La stationnarité de A vis-à-vis de chacun des paramètres $\theta_{\mathbf{k}}$ entraîne que, pour tout \mathbf{k} :

$$0 = V_0 (N_0 + N_e) \frac{\partial N_e}{\partial \theta_{\mathbf{k}}} + 2(e_{\mathbf{k}} - \mu) \operatorname{sh} \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{ch} \theta_{\mathbf{k}} + N_0 \frac{\partial F_{\mathbf{k}}}{\partial \theta_{\mathbf{k}}} \quad (20)$$

où le calcul de la dérivée de $F_{\mathbf{k}}$ est fait pour les valeurs des phases qui satisfont la relation (19). Si nous regroupons sur une première ligne les termes en $\operatorname{sh} \theta_{\mathbf{k}} \operatorname{ch} \theta_{\mathbf{k}}$

(y compris ceux provenant de la dérivée de $\text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}}$), et sur la seconde ceux qui proviennent de la dérivée de $\text{sh}\theta_{\mathbf{k}}\text{ch}\theta_{\mathbf{k}}$, nous obtenons :

$$0 = [V_0 (N_0 + N_e) + e_k - \mu + N_0 V_{\mathbf{k}}] 2 \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} - N_0 V_{\mathbf{k}} (\text{ch}^2\theta_{\mathbf{k}} + \text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}}) \quad (21)$$

La relation (21) devient alors :

$$0 = [e_k - \mu + V_0 (N_0 + N_e) + N_0 V_{\mathbf{k}}] \text{sh}2\theta_{\mathbf{k}} - N_0 V_{\mathbf{k}} \text{ch}2\theta_{\mathbf{k}} \quad (22)$$

soit :

$$\text{th}2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{N_0 V_{\mathbf{k}}}{e_k - \mu + V_0 (N_0 + N_e) + N_0 V_{\mathbf{k}}} \quad (23)$$

γ . *Stationnarité par rapport à N_0*

Ecrivons maintenant la stationnarité de A par rapport à N_0 . Compte tenu des relations (17) et (18), ainsi que du blocage des phases (19), nous obtenons :

$$0 = V_0 (N_0 + N_e) - \mu + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} [\text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}} - \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}}] \quad (24)$$

Ce résultat exprime que le potentiel chimique est égal à :

$$\mu = V_0 (N_0 + N_e) + \delta\mu \quad (25)$$

qui est la somme d'un terme de champ moyen $V_0 (N_0 + N_e)$ créé par toutes les particules et d'un terme $\delta\mu$:

$$\delta\mu = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} [\text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}} - \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}}] \quad (26)$$

Ce dernier est à son tour la somme de deux termes de signes différents : une contribution positive due aux processus d'échange d'impulsion et traduisant l'augmentation d'énergie de répulsion liée à l'effet de groupement entre bosons ; une contribution négative due aux termes de création ou d'annihilation de paires à partir du condensat $\mathbf{k} = 0$ (Figure 7 du Complément B_{XVII}), et traduisant la réduction de cette énergie due aux corrélations dynamiques introduites par les interactions.

La relation (23) devient alors :

$$\text{th}2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{N_0 V_{\mathbf{k}}}{\tilde{e}_k + N_0 V_{\mathbf{k}}} \quad (27)$$

avec :

$$\tilde{e}_k = e_k - \delta\mu \quad (28)$$

2-b. Solution des équations

L'état fondamental recherché dépend de deux paramètres qui sont fixés de l'extérieur, le volume L^3 du système physique, et le potentiel chimique μ qui contrôle le nombre total de particules. Les variables à déterminer sont les $\theta_{\mathbf{k}}$ par (27) ainsi que

N_0 par (24). Dans cette dernière équation intervient N_e , qui n'est pas une variable indépendante puisqu'elle est déterminée par (14). Nous sommes ainsi en présence d'un système d'équations non linéaires, dont la solution n'est pas évidente a priori : la relation (27) détermine les $\theta_{\mathbf{k}}(N_0)$, et donc $N_e(N_0)$, en fonction de N_0 . Mais N_0 est lui-même fixé en fonction de μ et des variables $\theta_{\mathbf{k}}$ (directement, et indirectement par l'intermédiaire de N_e) par la condition de stationnarité (24). Lorsque l'on reporte les $\theta_{\mathbf{k}}(N_0)$ dans cette relation, on obtient une équation implicite en N_0 , qui rappelle l'équation implicite pour le gap Δ dans la théorie BCS.

Une première approche pour résoudre cette équation implicite consiste à procéder par itérations successives, comme dans la méthode de Hartree-Fock. On part d'une valeur approximative de N_0 qui paraît raisonnable, par exemple celle μ/V_0 obtenue en supposant que N_e et $\delta\mu$ sont tous deux nuls. On obtient alors par (27) une première approximation des $\theta_{\mathbf{k}}$ ainsi que N_e , que l'on peut reporter dans (24) de façon à obtenir une nouvelle valeur de N_0 . On itère ensuite le processus et, comme pour les équations non linéaires de Hartree-Fock, on peut espérer une convergence au bout d'un certain nombre de cycles.

Une autre approche consiste à renoncer à fixer arbitrairement le potentiel chimique, et à plutôt le déduire du calcul. On part alors d'une valeur de N_0 arbitraire, d'où l'on déduit ensuite les valeurs des angles $\theta_{\mathbf{k}}$, puis la valeur de N_e par (14) ; ceci fixe le nombre total de particules $N = N_0 + N_e$, et les relations (25)-(26) fournissent le potentiel chimique. Cette approche est plus simple, et c'est celle que nous utiliserons dans toute la suite.

3. Propriétés de l'état fondamental

Nous commençons par calculer le nombre total moyen de particules. Pour dégager les idées générales tout en manipulant des équations aussi simples que possible, nous utiliserons un modèle où les éléments de matrice $V_{\mathbf{k}}$ du potentiel sont tous égaux à une même constante V_0 , ou alors nuls :

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{k}} &= V_0 & \text{si } |\mathbf{k}| \leq k_c \\ V_{\mathbf{k}} &= 0 & \text{si } |\mathbf{k}| > k_c \end{aligned} \quad (29)$$

où la "valeur de coupure" k_c caractérise la portée b du potentiel ($k_c \sim 1/b$). Pour apporter encore une simplification supplémentaire, dans chaque calcul nous envisagerons le cas où $\delta\mu = 0$, de sorte que \tilde{e}_k se confond avec e_k .

3-a. Nombre de particules, déplétion quantique

Utilisons la relation (14) pour calculer le nombre moyen N_e de particules dans les états individuels $\mathbf{k} \neq 0$. Pour obtenir $\text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}}$, commençons par calculer $\text{ch}2\theta_{\mathbf{k}}$ par :

$$\begin{aligned} \text{ch}2\theta_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\frac{\text{ch}^2 2\theta_{\mathbf{k}}}{\text{ch}^2 2\theta_{\mathbf{k}} - \text{sh}^2 2\theta_{\mathbf{k}}}} = \sqrt{\frac{1}{1 - \text{th}^2 2\theta_{\mathbf{k}}}} \\ &= \frac{\tilde{e}_k + N_0 V_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\tilde{e}_k (\tilde{e}_k + 2N_0 V_{\mathbf{k}})}} \end{aligned} \quad (30)$$

Comme d'autre part :

$$2\text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}} = \text{ch}^2\theta_{\mathbf{k}} + \text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}} - 1 = \text{ch}2\theta_{\mathbf{k}} - 1 \quad (31)$$

il en découle que :

$$\operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \left[\frac{\tilde{e}_k + N_0 V_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\tilde{e}_k (\tilde{e}_k + 2N_0 V_{\mathbf{k}})}} - 1 \right] \quad (32)$$

L'insertion de cette relation dans (14) fournit alors :

$$N_e = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left[\frac{\tilde{e}_k + N_0 V_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\tilde{e}_k (\tilde{e}_k + 2N_0 V_{\mathbf{k}})}} - 1 \right] \quad (33)$$

Nous avons évoqué plus haut un modèle simple (29) où les \tilde{e}_k sont simplement égaux aux e_k (on suppose que $\delta\mu$ est négligeable). Si de plus nous remplaçons la somme de (33) par une intégrale, nous obtenons :

$$N_e = \frac{L^3}{16\pi^3} \int d^3k \left[\frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + N_0 V_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} (\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2N_0 V_{\mathbf{k}})}} - 1 \right] \quad (34)$$

Si enfin nous utilisons les éléments de matrice du potentiel simplifiés de (29), la fonction à intégrer ne dépend plus que du module k de \mathbf{k} et, compte tenu de (29), s'annule si $k > k_c$; en coordonnées sphériques, l'intégrale sur dk est donc limitée entre 0 et k_c . Nous introduisons la variable d'intégration \mathbf{s} par :

$$\mathbf{s} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mN_0V_0}} \mathbf{k} = \xi \mathbf{k} \quad (35)$$

où ξ est la "longueur de relaxation" introduite⁴ au § 4-b du Complément C_{XV} :

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mN_0V_0}} \quad (36)$$

Si nous notons S_c la borne supérieure de \mathbf{s} découlant de l'existence de la borne k_c sur k :

$$S_c = \xi k_c \quad (37)$$

nous avons alors :

$$N_e = \frac{L^3}{4\pi^2} \left(\frac{2mN_0V_0}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{S_c} s^2 ds \left[\frac{s^2 + 1}{\sqrt{s^2 (s^2 + 2)}} - 1 \right] \quad (38)$$

L'intégrale de (38) reste convergente si S_c devient infini car, lorsque $s \rightarrow \infty$, on peut prendre comme infiniment petit $x = 1/s^2$ et écrire :

$$\frac{s^2 + 1}{\sqrt{s^2 (s^2 + 2)}} = \frac{1 + 1/s^2}{\sqrt{1 + 2/s^2}} = 1 + \frac{1}{2s^4} + \dots \quad (39)$$

4. Dans le Complément C_{XV}, nous avons défini en (61) une constante ξ en fonction du paramètre g associé à un potentiel d'interaction en $g\delta(\mathbf{r})$. Pour un tel potentiel, on a $V_0 = g/V$ (où V est le volume), de sorte que la relation (36) devient effectivement $\xi = \sqrt{\hbar^2/2mg n_0}$.

L'intégrale converge également à l'origine (la fonction à intégrer diverge en s^{-1} , mais l'élément d'intégration est en $s^2 ds$, ce qui élimine la divergence). Son calcul peut d'ailleurs être fait à la main. Lorsque S_c est pris infini (potentiel de très courte portée), on trouve que l'intégrale vaut $\sqrt{2}/3$, et donc :

$$N_e = \frac{L^3}{3\pi^2} \left(\frac{mN_0V_0}{\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (40)$$

Ainsi N_e est proportionnel au volume et au produit N_0V_0 à la puissance 3/2. Si le potentiel d'interaction est nul, on retrouve donc bien que toutes les particules sont dans l'état individuel $\mathbf{k} = 0$. Lorsque V_0 croît à partir de zéro, initialement la "fraction non condensée" $N_e/(N_0 + N_e)$ varie proportionnellement à la puissance 3/2 de V_0 .

Nous trouvons donc que l'effet du potentiel d'interaction est de transférer un certain nombre de particules de l'état individuel $\mathbf{k} = 0$ vers des états $\mathbf{k} \neq 0$. Cet effet porte souvent le nom de "déplétion quantique". Il n'a bien sûr rien à voir avec un effet d'excitation thermique qui porterait des particules de leur état fondamental vers des états excités sous l'effet d'un couplage avec un thermostat à température non nulle ; les calculs que nous menons dans ce complément sont relatifs à l'état fondamental, et supposent donc que la température est strictement nulle.

Remarque :

Le résultat (40) n'est cependant valable que si l'hypothèse $N_e \ll N_0$ qui a servi à l'établir est valide, donc si :

$$V_0 \ll \frac{\hbar^2}{mL^2} (N_0)^{-1/3} \quad (41)$$

Si b est la portée du potentiel et U son ordre de grandeur, selon (11) les éléments de matrice V_0 sont de l'ordre de Ub^3/L^3 ; la condition précédente s'écrit alors :

$$U \ll \frac{\hbar^2}{mb^2} \left(\frac{L^3}{b^3N_0} \right)^{1/3} \quad (42)$$

La condition de validité est donc que U reste petit devant l'énergie cinétique de localisation d'une particule dans la portée b du potentiel, multipliée par le rapport entre la distance moyenne entre particules dans l'état $\mathbf{k} = 0$ et b . Elle demande donc que la portée du potentiel b soit suffisamment petite.

3-b. Energie

Calculons maintenant l'énergie à partir de (10), dont nous prenons en compte successivement les différents termes.

α. Energie cinétique

La première contribution est celle de l'énergie cinétique qui, d'après (32), s'écrit :

$$E_c = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e_k \operatorname{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e_k \left[\frac{\tilde{e}_k + N_0 V_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\tilde{e}_k (\tilde{e}_k + 2N_0 V_{\mathbf{k}})}} - 1 \right] \quad (43)$$

Ce terme rappelle celui du calcul de N_e en (33), mais la présence du facteur e_k dans la somme change ses propriétés. Dans le modèle simplifié du potentiel où les $V_{\mathbf{k}}$ sont donnés par (29), et où de plus nous supposons que $\delta\mu = 0$, le changement de variables (35) conduit à :

$$E_c = \frac{L^3}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} [N_0 V_0]^{5/2} \int_0^{S_c} ds s^4 \left[\frac{s^2 + 1}{\sqrt{s^2 (s^2 + 2)}} - 1 \right] \quad (44)$$

D'après (39), lorsque $s \rightarrow \infty$, la fonction à intégrer se comporte suivant :

$$s^4 \left[\frac{s^2 + 1}{\sqrt{s^2 (s^2 + 2)}} - 1 \right] = s^4 \left[1 + \frac{1}{2s^4} + \dots - 1 \right] = \frac{1}{2} + 0 \left(\frac{1}{s^2} \right) \quad (45)$$

Puisque la fonction à intégrer tend à l'infini vers une constante, l'intégrale sur ds est divergente si S_c est infini ; si S_c est grand mais fini, la valeur de l'intégrale dépend linéairement du choix de S_c .

β . Interaction avec le condensat

Dans (10), le terme de champ moyen dans l'énergie $V_0 (N_0 + N_e)^2 / 2$ est connu, puisque N_e a été obtenu plus haut – cf. relation (38). Nous n'avons donc pas à calculer spécifiquement sa contribution à l'énergie moyenne.

Le second terme dans l'énergie potentielle est proportionnel à N_0 , et correspond aux interactions entre atomes hors du condensat (états individuels $\mathbf{k} \neq 0$) et dans le condensat (population de l'état $\mathbf{k} = 0$) ; ce terme contient la somme des $F_{\mathbf{k}}$ définis en (18). Pour l'évaluer, nous avons donc besoin de calculer le produit $\text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{2} \text{sh}2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\text{sh}^2 2\theta_{\mathbf{k}}}{\text{ch}^2 2\theta_{\mathbf{k}} - \text{sh}^2 2\theta_{\mathbf{k}}}} \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\text{th}^2 2\theta_{\mathbf{k}}}{1 - \text{th}^2 2\theta_{\mathbf{k}}}} \end{aligned} \quad (46)$$

soit, d'après (27) :

$$\text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} = \frac{N_0 V_{\mathbf{k}}}{2\sqrt{\tilde{e}_k (\tilde{e}_k + 2N_0 V_{\mathbf{k}})}} \quad (47)$$

Compte tenu de la condition de blocage de phase (19), dans l'état variationnel optimal les $F_{\mathbf{k}}$ définis en (18) prennent la valeur :

$$\begin{aligned} F_{\mathbf{k}} &= V_{\mathbf{k}} [\text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} - \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}}] \\ &= \frac{V_{\mathbf{k}}}{2} \left[\frac{\tilde{e}_k}{\sqrt{\tilde{e}_k (\tilde{e}_k + 2N_0 V_{\mathbf{k}})}} - 1 \right] \end{aligned} \quad (48)$$

Nous obtenons ainsi une contribution E_{N_0} à l'énergie :

$$E_{N_0} = N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} F_{\mathbf{k}} = \frac{N_0}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} \left[\frac{\tilde{e}_k}{\sqrt{\tilde{e}_k (\tilde{e}_k + 2N_0 V_{\mathbf{k}})}} - 1 \right] \quad (49)$$

Dans le cas du modèle simple (29) déjà utilisé plus haut, et si $\delta\mu = 0$, ce résultat devient :

$$E_{N_0} = \frac{L^3}{4\pi^2} N_0 V_0 \left(\frac{2mN_0V_0}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{S_c} s^2 ds \left[\sqrt{\frac{s^2}{s^2+2}} - 1 \right] \quad (50)$$

La fonction à intégrer se comporte à l'infini comme :

$$s^2 \left[\frac{s}{\sqrt{s^2+2}} - 1 \right] \sim s^2 \left[1 - \frac{1}{s^2} + \dots - 1 \right] = -1 + 0 \left(\frac{1}{s^2} \right) \quad (51)$$

de sorte que l'intégrale n'est pas convergente lorsque $S_c \rightarrow \infty$, mais dépend linéairement de S_c .

γ . *Energie totale du fondamental*

Toujours lorsque $\delta\mu = 0$, la somme de (43) et (49) fournit :

$$E_c + E_{N_0} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left[\sqrt{e_k (e_k + 2N_0 V_{\mathbf{k}})} - e_k - N_0 V_{\mathbf{k}} \right] \quad (52)$$

soit encore, si l'on prend à nouveau le modèle simplifié (29) du potentiel d'interaction et si l'on effectue la somme de (44) et de (50) :

$$E_c + E_{N_0} = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2mL^2}{\hbar^2} \right)^{3/2} (N_0 V_0)^{5/2} \int_0^{S_c} ds \left[s^3 \sqrt{(s^2+2)} - s^4 - s^2 \right] \quad (53)$$

Les relations (45) et (51) montrent que la fonction à intégrer tend vers $-1/2$ lorsque $s \rightarrow \infty$; cette intégrale est donc elle aussi divergente lorsque $k_c \rightarrow \infty$ (ou $S_c \rightarrow \infty$). Il s'ensuit que sa valeur dépend linéairement du choix de la fréquence de coupure k_c . Le fait que la limite de la fonction soit négative indique cependant que, lorsque S_c est grand, la diminution d'énergie potentielle l'emporte sur l'augmentation d'énergie cinétique.

L'énergie totale du niveau fondamental E_{fond} est la somme des énergies ainsi calculées avec le terme de champ moyen :

$$E_{\text{fond}} = \frac{V_0}{2} (N_0 + N_e)^2 + E_c + E_{N_0} \quad (54)$$

où $E_c + E_{N_0}$ est donné en (53).

3-c. **Blocage des phases ; comparaison avec le mécanisme BCS**

Nous avons vu au § 2-a- α comment toutes les phases $\zeta_{\mathbf{k}}$ devaient devenir égales à celle ζ_0 associée à l'état $\mathbf{k} = 0$ afin de minimiser l'énergie de répulsion entre particules dans les états $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ et dans l'état $\mathbf{k} = 0$; cette nullité de la différence des phases constitue ce que nous avons appelé la "condition de blocage des phases". La situation rappelle donc la "brisure de symétrie" du mécanisme BCS, où un blocage commun de phase relative de toutes les paires $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$ permettait la construction d'un gap Δ grâce à un effet collectif. Pour des bosons, l'équivalent du champ moyen collectif créé par les paires est celui créé par le condensat des particules dans l'état

$\mathbf{k} = 0$. C'est pourquoi c'est la phase relative des états des paires avec celle du condensat qui intervient ; il s'agit donc en quelque sorte d'un mécanisme "externe" au lieu d'être "interne". Peu importe la phase ζ_0 , le gain d'énergie étant exactement le même quelle que soit sa valeur ; seule la phase relative $\zeta_{\mathbf{k}} - \zeta_0$ est importante. Donc, comme pour les fermions, le choix arbitraire de phase donne lieu à un phénomène de brisure de symétrie. Cette analogie est renforcée par le fait que, à μ fixé, nous avons trouvé au § 2-b que la valeur du nombre N_0 de particules dans l'état $\mathbf{k} = 0$ est donnée par une équation implicite en N_0 ; de même, en théorie BCS, c'est une équation implicite qui fixe la valeur du gap Δ .

Les relations (38) et (53) font intervenir des puissances non entières du potentiel d'interaction V_0 , et sont ainsi des fonctions non analytiques de ce potentiel. Elles ne peuvent donc pas s'obtenir comme un développement en puissances de V_0 dans le cadre d'une théorie des perturbations. C'est une autre analogie avec les résultats du Complément B_{XVII}.

Nous avons également vu dans ce complément que, pour le mécanisme BCS, ce sont les énergies au voisinage du niveau de Fermi qui jouent le rôle le plus important. Il en va différemment pour un système de bosons répulsifs. Par exemple, dans (44), la fonction dont l'intégration sur s fournit l'énergie cinétique est :

$$f_c(s) = s^4 \left[\frac{s^2 + 1}{\sqrt{s^2(s^2 + 2)}} - 1 \right] \quad (55)$$

alors que celle qui donne l'énergie potentielle d'interaction entre particules dans les états $\mathbf{k} \neq 0$ et particules dans l'état $\mathbf{k} = 0$ est :

$$f_{N_0}(s) = s^2 \left[\frac{s^2}{\sqrt{s^2(s^2 + 2)}} - 1 \right] \quad (56)$$

La figure 1 représente ces deux fonctions en traits tiretés, ainsi que leur somme en trait plein. Elle illustre comment, pour des bosons répulsifs, les effets de minimisation de l'énergie potentielle l'emportent sur ceux de l'énergie cinétique. Cette minimisation de la répulsion implique nécessairement une modification de la fonction de corrélation de la position entre particules, qui diminue à courte distance ; nous confirmerons cette interprétation lors de l'étude des fonctions de corrélation binaire au § 3-d- β . On voit également sur la figure que le gain d'énergie cumulé n'est pas dû à une bande particulière d'énergies : toutes les valeurs de s contribuent jusqu'à la limite imposée par la borne supérieure de l'intégrale.

On peut affiner l'analyse de cette balance d'énergies en s'intéressant au gain d'énergie par état quantique individuel. Il faut alors supprimer dans les relations précédentes le facteur k^2 qui provient de la densité d'états, donc supprimer un facteur s^2 de (55) et (56). La Figure 2 montre les variations des fonctions qui sont alors obtenues. On constate que, tant que s reste petit ou de l'ordre de 1, la diminution d'énergie potentielle l'emporte de beaucoup sur l'augmentation d'énergie cinétique ; en revanche, les deux contributions deviennent comparables lorsque $s \gg 1$. D'après (35), la condition $s \lesssim 1$ correspond à :

$$k \lesssim \xi^{-1} \quad \text{soit :} \quad e_k \lesssim N_0 V_0 \quad (57)$$

Ainsi c'est aux faibles énergies que chaque état individuel participe le plus fortement à la diminution de l'énergie potentielle de répulsion ; le domaine d'énergies correspondant est proportionnel à N_0 et à l'élément de matrice d'interaction V_0 . Les relations

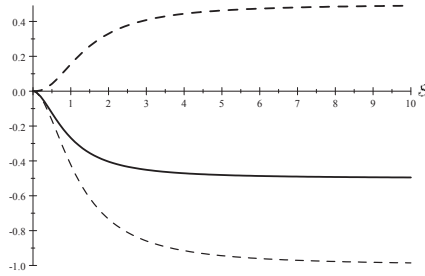


FIGURE 1 – Variations en fonction de s des fonctions à intégrer sur s pour obtenir l'énergie cinétique E_c (courbe tiretée du haut), l'énergie potentielle d'interaction avec le condensat E_{N_0} (courbe tiretée du bas), ainsi que leur somme (trait plein). L'augmentation d'énergie cinétique est plus que compensée par une diminution d'énergie potentielle, ce qui permet de diminuer l'énergie totale.

(27) indiquent que ce sont également pour ces énergies que l'état fondamental du système physique est le plus modifié par la minimisation de l'énergie. Physiquement, on comprend bien que les particules d'énergie cinétique faible devant l'énergie d'interaction $N_0 V_0$ soient particulièrement sensibles aux interactions, alors que celles dont l'énergie cinétique est grande devant $N_0 V_0$ voient leurs corrélations relativement peu modifiées par le potentiel d'interaction. Cependant, et comme nous l'avons vu plus haut, même si individuellement les états de plus forte énergie contribuent moins à la réduction d'énergie, leur grand nombre (qui se traduit par une densité d'états proportionnelle à k^2) fait qu'ils apportent également une contribution significative à l'énergie totale.

3-d. Fonctions de corrélation

Le système étant contenu dans une boîte et soumis aux conditions périodiques, nous nous attendons à ce que les propriétés des fonctions de corrélation à un corps soient invariantes par translation. Cela n'exclut toutefois par une dépendance spatiale possible des fonctions de corrélation par rapport à des différences de position. C'est ce que nous vérifions maintenant.

$\alpha.$ Une particule

Si nous développons l'opérateur champ $\Psi(\mathbf{r})$ sur les opérateurs d'annihilation, selon la relation (A-3) du Chapitre XVI, nous obtenons l'expression suivante de la fonction de corrélation G_1 à une particule :

$$G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \Phi_B | \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') | \Phi_B \rangle = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}' - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \langle \Phi_B | a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} | \Phi_B \rangle \quad (58)$$

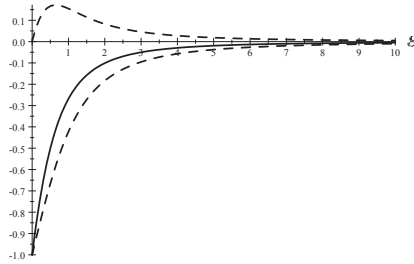


FIGURE 2 – Variations en fonction de s de l'énergie cinétique (courbe tirée du haut) et potentielle (courbe tirée du bas) et totale (trait plein) par état individuel. On constate que ce sont les états d'énergies cinétiques les plus basses qui contribuent le plus à la diminution d'énergie.

où l'expression (3) détermine $|\Phi_B\rangle$. Comme, dans cet état, le nombre de particules dans un état individuel \mathbf{k} est toujours égal à celui dans l'état individuel $-\mathbf{k}$, la valeur moyenne de $a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'}$ dans $|\Phi_B\rangle$ ne peut être différente de zéro que si $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. Dans la somme sur \mathbf{k} , la contribution de $\mathbf{k} = 0$ introduit un terme en N_0 ; si nous y ajoutons les autres contributions, nous obtenons :

$$G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{L^3} \left[N_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \right] \quad (59)$$

Lorsque $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, la fonction G_1 est simplement égale à la densité numérique totale n_T de particules :

$$n_T = \frac{N_0 + N_e}{L^3} \quad (60)$$

Lorsque \mathbf{r} et \mathbf{r}' sont différents, elle est la somme de deux termes :

- un terme correspondant aux particules dans l'état $\mathbf{k} = 0$ (particules condensées), indépendant des positions; il ne décroît donc pas à grande distance, mais possède une portée infinie;
- un terme correspondant aux particules dans l'état $\mathbf{k} \neq 0$, qui est la transformée de la distribution $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle$ de particules, et qui décroît donc vers zéro lorsque \mathbf{r} et \mathbf{r}' s'éloignent l'un de l'autre (sa portée est microscopique).

On retrouve le critère de Penrose-Onsager selon lequel c'est la fraction condensée d'un système de bosons qui donne une portée infinie à la fonction de corrélation non diagonale à un corps (pour des fermions appariés, nous avons trouvé au Complément B_{XVII} que cette portée infinie n'apparaît pas pour la fonction de corrélation à un corps, mais seulement pour la fonction de corrélation à deux corps).

β . Deux particules

La fonction de corrélation diagonale à deux particules s'écrit :

$$\begin{aligned} G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \mathbf{r}', \mathbf{r}') &= \langle \Phi_B | \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}) | \Phi_B \rangle \\ &= \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''} e^{i(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} \langle \Phi_B | a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}''} a_{\mathbf{k}'''} | \Phi_B \rangle \end{aligned} \quad (61)$$

Les mêmes simplifications qu'au § 4-b- β du Complément B_{XVII} apparaissent dans le calcul des valeurs moyennes des produits d'opérateur création et annihilation : les opérateurs a_0 à droite donnent chacun un facteur α_0 et les opérateurs a_0^\dagger à gauche chacun un facteur α_0^* ; les valeurs moyennes des autres produits d'opérateurs sont données par les résultats du § C du Chapitre XVII. Nous distinguons alors plusieurs cas, selon le nombre des valeurs des 4 indices de sommation égales à $\mathbf{k} = 0$, et en procédant par valeurs décroissantes.

(i) Si les quatre opérateurs concernent l'état $\mathbf{k} = 0$ (cas représenté sur la Figure 6 du Complément B_{XVII}), nous obtenons la contribution :

$$\frac{N_0(N_0 - 1)}{L^6} \simeq \left(\frac{N_0}{L^3} \right)^2 \quad (62)$$

indépendante des positions.

Il n'est pas possible que trois seulement des indices de sommation soient nuls, car le terme correspondant contiendrait alors la valeur moyenne d'un opérateur $a_{\mathbf{k}}$ (ou de son hermitique conjugué) dans l'état $|\Phi_B\rangle$, qui est nulle.

(ii) Si un opérateur de création et un opérateur d'annihilation concernent l'état individuel $\mathbf{k} = 0$, deux cas sont possibles :

– termes directs en $a_0^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_0$ ou $a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_0^\dagger a_0 a_{\mathbf{k}'}$; les deux contributions sont égales et leur somme introduit un terme :

$$\frac{2N_0 N_e}{L^6} \quad (63)$$

qui est lui aussi indépendant des positions;

– termes d'échange en $a_0^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0 a_{\mathbf{k}'}$ ou $a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_0^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_0$; les termes correspondant sont eux aussi égaux, et leur somme s'écrit :

$$\begin{aligned} &\frac{N_0}{L^6} \left\{ \sum_{\mathbf{k}' \neq 0} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}'} \rangle + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \right\} \\ &= \frac{2N_0}{L^6} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})] \end{aligned} \quad (64)$$

qui dépend de la différence des positions \mathbf{r} et \mathbf{r}' . Ces termes traduisent l'existence d'un effet de groupement entre les bosons; la relation (C-28) du Chapitre XVII fournit la valeur de $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle$:

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle = \text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} \quad (65)$$

(iii) Si les opérateurs relatifs à $\mathbf{k} = 0$ sont de même nature (tous deux de création, ou tous deux d'annihilation), il s'agit de termes du type de ceux représentés

sur la Figure 7 du Complément B_{XVII} (création ou annihilation de paires à partir du condensat). Alors :

– s'il s'agit du produit $a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_0 a_0$ où \mathbf{k} et \mathbf{k}' ne sont pas nuls mais opposés (pour la même raison que plus haut), il apparaît une valeur moyenne anormale dans l'état $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle$ ainsi que la valeur moyenne d'un produit de deux opérateurs a_0 ; la première est fournie par la relation (C-51) du Chapitre XVII, la seconde introduit $(\alpha_0)^2$, c'est-à-dire $N_0 e^{2i\zeta_0}$ selon (7) ;

– s'il s'agit du produit $a_0^\dagger a_0^\dagger a_{\mathbf{k}''} a_{-\mathbf{k}''}$ où \mathbf{k}'' et \mathbf{k}''' ne sont pas nuls mais opposés, on obtient le résultat complexe conjugué. La somme des deux contributions correspondantes s'écrit donc :

$$\begin{aligned}
 & -\frac{N_0}{L^6} \left\{ \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} e^{2i(\zeta_0 - \zeta_{\mathbf{k}})} \right. \\
 & \quad \left. + \sum_{\mathbf{k}'' \neq 0} e^{i\mathbf{k}'' \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} e^{-2i(\zeta_0 - \zeta_{\mathbf{k}})} \right\} \\
 & = -\frac{2N_0}{L^6} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) + 2(\zeta_0 - \zeta_{\mathbf{k}})] \quad (66)
 \end{aligned}$$

(iv) Il existe enfin des termes où aucun des vecteurs d'onde n'est nul, qui correspondent au cas où les deux particules sont avant et après interaction dans des états $\mathbf{k} \neq 0$. Ils comprennent chacun un terme direct :

$$\frac{(N_e)^2}{L^6} \quad (67)$$

qui est constant, un terme d'échange, et enfin un terme d'annihilation-création de paires. Contrairement aux précédents, ils ne sont pas proportionnels à N_0 , et leur ordre de grandeur relatif par rapport à eux est donc en N_e/N_0 . La prise en compte du terme d'échange et de celui d'annihilation-création de paires ne présente pas de difficulté particulière (le calcul est du même type que ceux que nous avons déjà effectués) ; cependant, pour rester cohérents avec (12) et les approximations à l'énergie faites qui en découlent, nous n'incluerons pas ces termes.

La somme de (62), (63) et (67) fait apparaître la constante N^2/L^6 ; ajoutons-y (64) et (66), nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \mathbf{r}', \mathbf{r}') \simeq & \frac{N^2}{L^6} + \frac{2N_0}{L^6} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left\{ \text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}} \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})] \right. \\
 & \left. - \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}} \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) + 2(\zeta_0 - \zeta_{\mathbf{k}})] \right\} \quad (68)
 \end{aligned}$$

Le terme dépendant de la position de la seconde ligne illustre bien comment les phases relatives qui entrent dans la construction de $|\Phi_B\rangle$ contrôlent la position relative des particules dans le système physique, et confirme que le choix $\zeta_{\mathbf{k}} = \zeta_0$ permet de diminuer la probabilité de les trouver à courte distance.

Lorsque la relation de blocage des phases (19) est satisfaite, la contribution

dépendant de la position relative devient :

$$\frac{2N_0}{L^6} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} [\text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}} - \text{sh}\theta_{\mathbf{k}}\text{ch}\theta_{\mathbf{k}}] \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})] \quad (69)$$

Comme $\text{sh}\theta_{\mathbf{k}} < \text{ch}\theta_{\mathbf{k}}$, le coefficient du cosinus de chaque terme est alors négatif ; ce terme diminue donc effectivement la probabilité de présence double $G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \mathbf{r}, \mathbf{r})$ de deux particules au même point \mathbf{r} : les corrélations dynamiques qui apparaissent dans le système tendent à dégroupier les particules, et donc à diminuer leur interaction répulsive. Le résultat final résulte d'un compromis entre un terme en $\text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}}$ qui donne lieu à un groupement (comme dans un gaz de bosons sans interactions) et un terme de dégroupement en $\text{sh}\theta_{\mathbf{k}}\text{ch}\theta_{\mathbf{k}}$ qui l'emporte, et fait intervenir les valeurs moyennes anormales (création ou annihilation de paires de particules dans le condensat).

Remarques :

(i) La fonction de corrélation (68) est invariante par échange de \mathbf{r} et \mathbf{r}' , comme le montre la prise en compte des termes \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$ dans la sommation. Sa transformée de Fourier ne contient donc que des termes en $\cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})]$, auxquels on peut donner une valeur quelconque par un choix approprié des $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$. Comme annoncé dans l'introduction, l'état variationnel permet donc effectivement de produire une fonction de corrélation quelconque, dont nous avons étudié ci-dessus la valeur optimisée.

(ii) Nous avons à plusieurs reprises supposé la nullité de la correction $\delta\mu$ au potentiel chimique définie en (26), ce qui nous a permis de remplacer les $e_{\mathbf{k}}$ par les $\tilde{e}_{\mathbf{k}}$. Vérifions maintenant que la prise en compte d'une valeur non nulle de cette correction ne change pas radicalement les résultats obtenus.

Dans le cas du modèle (29) où les éléments de matrice $V_{\mathbf{k}}$ non nuls du potentiel sont tous égaux à une même constante V_0 , l'expression (26) se simplifie en :

$$\delta\mu = V_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} [\text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}} - \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} \text{ch}\theta_{\mathbf{k}}] = -V_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \text{sh}\theta_{\mathbf{k}} e^{-\theta_{\mathbf{k}}} \leq 0 \quad (70)$$

où la somme est restreinte aux vecteurs \mathbf{k} de module inférieur à k_c . Si nous posons :

$$\delta\mu = -xV_0N_0 \quad (71)$$

avec $x > 0$, et la relation (27) qui fixe les $\theta_{\mathbf{k}}$ devient :

$$\text{th}2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{N_0V_0}{e_{\mathbf{k}} + N_0V_0(1+x)} \quad (72)$$

Les $\theta_{\mathbf{k}}$ sont donc diminués sous l'effet de la correction apportée par x et $\delta\mu$; cette correction reste toutefois négligeable dès que $e_{\mathbf{k}} \gg xN_0V_0$. Ainsi, les populations des niveaux individuels \mathbf{k} (égales à $\text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}}$) sont diminuées lorsque $e_{\mathbf{k}} \lesssim xN_0V_0$, mais restent pratiquement inchangées dans la situation inverse.

Les grandeurs sommées sur les valeurs de \mathbf{k} comme N_e sont alors peu affectées : le changement de la fonction à intégrer n'intervient que pour les petites valeurs de s dont les contributions sont de toutes façons faibles à cause du facteur s^2 sous l'intégrale de (38). Pour l'énergie, c'est encore plus vrai puisque l'intégrale de (53) est divergente si S_c est infini, ce qui indique qu'elle est surtout sensible aux grandes valeurs de s (si $S_c \gg 1$). Quant aux fonctions de corrélations évaluées au § 3-d, elles contiennent des sommes sur \mathbf{k} qui introduisent les mêmes intégrales ; elles manifestent donc elles aussi une relative insensibilité à la valeur de $\delta\mu$. C'est pourquoi, à part les prévisions concernant les populations des niveaux de faibles nombres d'onde, l'approximation $\delta\mu = 0$ utilisée au § 3 reste raisonnable dans de nombreux cas.

Pour aller plus loin dans l'analyse, il faudrait pousser le calcul afin d'obtenir la valeur du coefficient x . Ceci demanderait d'améliorer la précision des calculs, et en particulier de ne plus négliger les interactions entre particules dans les états individuels $\mathbf{k} \neq 0$. Une telle étude dépasserait le cadre de ce complément, et nous nous contenterons donc d'admettre que x est petit et de noter que seules les populations de faibles k sont modifiées par la non-nullité de $\delta\mu$.

4. Méthode opératorielle de Bogolubov

Nous allons maintenant prendre un point de vue différent et introduire la méthode de Bogolubov ; cette dernière consiste à rechercher une forme opératorielle directement diagonalisable de l'hamiltonien, ou d'une forme approchée de cet hamiltonien. Cette méthode n'est pas limitée à l'état fondamental, contrairement aux calculs que nous avons présentés jusqu'ici, mais permet également d'aborder l'étude des états excités. Nous allons faire usage des résultats du § E du Chapitre XVII pour introduire de nouveaux opérateurs qui simplifient la diagonalisation de l'hamiltonien.

4-a. Espace variationnel, restriction de l'hamiltonien

L'ensemble variationnel que nous considérons maintenant est celui défini en (3) ; nous supposons donc que :

$$|\Phi_B\rangle = |\varphi_0\rangle \otimes |\Psi_{\text{app}}\rangle \quad (73)$$

où $|\varphi_0\rangle$ est à nouveau l'état cohérent (6), et où $|\Psi_{\text{app}}\rangle$ est un ket apparié quelconque de l'espace de Fock engendré par tous les états individuels autres que $\mathbf{k} = 0$. Nous appelons $\mathcal{E}_B(N_0)$ l'ensemble des kets de la forme (73).

Prenons alors l'opérateur hamiltonien général \widehat{H} écrit en (8) au Complément B_{XVII}, et considérons son action restreinte entre de tels états ; les éléments de matrice correspondants sont du type :

$$\langle \Phi_B | \widehat{H} | \Phi'_B \rangle \quad (74)$$

où $|\Phi_B\rangle$ et $|\Phi'_B\rangle$ sont deux kets quelconques de $\mathcal{E}_B(N_0)$. Dans cet élément de matrice, les mêmes simplifications qu'au § 1 se produisent : tout opérateur d'annihilation à droite a_0 peut être remplacé par le nombre α_0 , tout opérateur de création a_0^\dagger à gauche par le complexe conjugué α_0^* . Nous allons simplifier encore le problème en supposant, comme en (12), que la population totale N_e des niveaux individuels $\mathbf{k} \neq 0$ est très petite devant $N_0 = |\alpha_0|^2$, et en ne retenant que certains termes dans les termes d'interaction de l'hamiltonien.

En premier lieu, nous prenons en compte tous les termes de diffusion vers l'avant ($\mathbf{k}'' = \mathbf{k}$ et $\mathbf{k}''' = \mathbf{k}'$) qui, comme nous l'avons vu plus haut, font intervenir l'élément de matrice V_0 et s'écrivent :

$$\frac{V_0}{2} \widehat{N} (\widehat{N} - 1) \quad (75)$$

où \widehat{N} est l'opérateur nombre total de particules. Nous avons :

$$\widehat{N} = N_0 + \widehat{N}_e \quad (76)$$

où \widehat{N}_e est l'opérateur associé au nombre total de particules dans les états individuels $\mathbf{k} \neq 0$. Comme N_0 est un nombre, les fluctuations du nombre total de particules proviennent uniquement de celles de \widehat{N}_e , que nous supposons très petites devant N_0 . Si nous négligeons ces fluctuations et notons $N = N_0 + N_e$ le nombre total moyen de particules, la valeur moyenne de l'opérateur $\widehat{N} (\widehat{N} - 1)$ dans tout ket de $\mathcal{E}_B(N_0)$ devient :

$$\langle \widehat{N} (\widehat{N} - 1) \rangle \simeq N(N - 1) \simeq N^2 \quad (77)$$

Nous pouvons alors simplement remplacer l'opérateur de champ moyen (75) par le nombre :

$$\frac{V_0 N^2}{2} \quad (78)$$

Pour tous les autres termes d'interaction, nous procédons comme au § 1-c et nous ne retenons que les termes d'interaction qui contiennent N_0 – les autres termes correspondent à des interactions entre particules dans les états individuels $\mathbf{k} \neq 0$, que nous supposons négligeables lorsque l'inégalité (12) est satisfaite. Les termes retenus incluent alors, soit quatre, soit deux opérateurs de création ou d'annihilation relatifs à l'état $\mathbf{k} = 0$.

Pour ceux qui contiennent le produit $a_0^\dagger a_0^\dagger a_0 a_0$, ou l'un des deux produits $a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0^\dagger a_0 a_{\mathbf{k}}$ et $a_0^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} a_0$, ils sont déjà pris en compte dans le terme de champ moyen (75). Il ne reste donc à leur ajouter que :

– ceux contenant les produits $a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0^\dagger a_{\mathbf{k}} a_0$ ou $a_0^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0 a_{\mathbf{k}}$, c'est-à-dire les termes d'échange du § 4-b- β du Complément B_{XVII} ; ils introduisent une contribution :

$$N_0 V_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad (79)$$

– les termes de création de paires à partir du condensat en $a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_0 a_0$, ou ceux d'annihilation de paires vers le condensat en $a_0^\dagger a_0^\dagger a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}$, qui introduisent :

$$\frac{N_0 V_{\mathbf{k}}}{2} \left[a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \right] \quad (80)$$

Dans ces conditions, on arrive à une expression simplifiée de l'hamiltonien \widehat{H} , qui devient un hamiltonien réduit \widehat{H}_R s'écrivant :

$$\widehat{H}_R = \frac{V_0 N^2}{2} + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + N_0 V_{\mathbf{k}} \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}}{2} \right] \quad (81)$$

Un tel opérateur ne conserve pas le nombre total de particules à cause de ses termes proportionnels au produit de deux opérateurs de création, ou d'annihilation. Nous avons vu dans le Complément B_{XVII} comment de tels termes “anormaux” peuvent cependant rendre compte de l'effet des interactions dans le cadre de certaines approximations. Nous allons maintenant montrer que cette expression peut être mise sous la forme d'un hamiltonien de particules indépendantes, moyennant la transformation des opérateurs introduite au § E du Chapitre XVII.

4-b. Hamiltonien de Bogolubov

L'expression (E-29) de l'opérateur hamiltonien \widehat{H}_B obtenue au Chapitre XVII est :

$$\widehat{H}_B = \sum_{\mathbf{k} \in D} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \left[b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} \right] \quad (82)$$

où apparaissent les opérateurs de Bogolubov pour des bosons :

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ b_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger \end{aligned} \quad (83)$$

Rappelons que D est un demi-espace de l'espace des impulsions, ce qui permet d'éviter une double prise en compte des mêmes paires d'états dans (82). La relation (E-15) du Chapitre XVII exprime les $u_{\mathbf{k}}$ et $v_{\mathbf{k}}$ en fonction de deux paramètres $\theta_{\mathbf{k}}$ et $\zeta_{\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \text{ch} \theta_{\mathbf{k}} e^{-i\zeta_{\mathbf{k}}} \\ v_{\mathbf{k}} &= \text{sh} \theta_{\mathbf{k}} e^{i\zeta_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (84)$$

Pour la valeur du paramètre $\omega_{\mathbf{k}}$, elle sera fixée ultérieurement.

Nous avons alors :

$$b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} = |u_{\mathbf{k}}|^2 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + |v_{\mathbf{k}}|^2 a_{-\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger + \left(u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \right) \quad (85)$$

et :

$$b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} = |u_{\mathbf{k}}|^2 a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}} + |v_{\mathbf{k}}|^2 a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger + \left(u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \right) \quad (86)$$

Les opérateurs dans ces égalités peuvent être mis dans l'ordre normal grâce à une commutation appropriée ; en effectuant ensuite la somme, nous obtenons :

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} &= \left(|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 \right) \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}} \right) \\ &\quad + 2 |v_{\mathbf{k}}|^2 + 2 u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger + 2 u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (87)$$

soit, compte tenu de (84) :

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} &= \text{ch} 2\theta_{\mathbf{k}} \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}} \right] \\ &\quad + 2 \text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} + \text{sh} 2\theta_{\mathbf{k}} \left[a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{2i\zeta_{\mathbf{k}}} + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} e^{-2i\zeta_{\mathbf{k}}} \right] \end{aligned} \quad (88)$$

L'opérateur \widehat{H}_B s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \widehat{H}_B &= \sum_{\mathbf{k} \in D} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \left\{ \text{ch} 2\theta_{\mathbf{k}} \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}} \right] \right. \\ &\quad \left. + 2 \text{sh}^2 \theta_{\mathbf{k}} + \text{sh} 2\theta_{\mathbf{k}} \left[a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{2i\zeta_{\mathbf{k}}} + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} e^{-2i\zeta_{\mathbf{k}}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (89)$$

Or cet hamiltonien peut être identifié à l'hamiltonien approché (81). Pour cela, remplaçons $\text{ch}2\theta_{\mathbf{k}}$ par l'expression (30), $\text{sh}2\theta_{\mathbf{k}}$ par le double de (47), et $\text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}}$ par (32), dans le cadre du modèle simplifié où $\delta\mu = 0$ et où l'on remplace les \tilde{e}_k par les e_k . De plus, nous choisissons pour ω_k la valeur :

$$\hbar\omega_k = \sqrt{e_k(e_k + 2N_0V_{\mathbf{k}})} \quad (90)$$

et nous supposons que tous les $\zeta_{\mathbf{k}}$ sont nuls. Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} \hat{H}_B = \sum_{\mathbf{k} \in D} \left\{ (e_k + N_0V_{\mathbf{k}}) \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}} \right] \right. \\ \left. + \frac{N_0V_{\mathbf{k}}}{2} \left[a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{2i\zeta_{\mathbf{k}}} + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \right] \right\} - \Delta E_{\text{fond}} \end{aligned} \quad (91)$$

avec, compte tenu à nouveau de la valeur (32) de $\text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{fond}} = -2 \sum_{\mathbf{k} \in D} \hbar\omega_k \text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hbar\omega_k \text{sh}^2\theta_{\mathbf{k}} \\ = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left[\sqrt{e_k(e_k + 2N_0V_{\mathbf{k}})} - e_k - N_0V_{\mathbf{k}} \right] \end{aligned} \quad (92)$$

La comparaison avec les égalités (52) et (54) montre que ΔE_{fond} n'est autre que l'énergie E_{fond} déjà obtenue, décalée de la valeur du champ moyen :

$$\Delta E_{\text{fond}} = E_{\text{fond}} - \frac{V_0 N^2}{2} \quad (93)$$

Pour finir, compte tenu de (81), si l'on choisit tous les $\zeta_{\mathbf{k}}$ nuls (condition de blocage de phase) on a simplement :

$$\hat{H}_R = \hat{H}_B + E_{\text{fond}} \quad (94)$$

4-c. Construction d'une base d'états excités, quasi-particules

Comme E_{fond} est un nombre, il introduit un simple déplacement d'énergie des valeurs propres de \hat{H}_R par rapport à celles de \hat{H}_B , sans aucun effet sur les vecteurs propres. Or nous avons vu au § E-3 du Chapitre XVII que les valeurs propres de \hat{H}_B sont connues, puisqu'elles s'écrivent :

$$E_B = \sum_{\mathbf{k} \in D} [\bar{n}(\mathbf{k}) + \bar{n}(-\mathbf{k})] \hbar\omega_k \quad (95)$$

où $n(\mathbf{k})$ et $n(-\mathbf{k})$ sont des entiers positifs ou nuls quelconques. Quant aux états propres associés à ces énergies, ils s'obtiennent simplement en faisant agir sur l'état fondamental le produit suivant d'opérateurs de création :

$$\prod_{\mathbf{k} \in D} \left[b_{\mathbf{k}}^\dagger \right]^{\bar{n}(\mathbf{k})} \left[b_{-\mathbf{k}}^\dagger \right]^{\bar{n}(-\mathbf{k})} \quad (96)$$

Pour finir, l'opérateur \hat{H}_B partage beaucoup de propriétés avec l'hamiltonien d'un ensemble de particules sans interactions mutuelles. De même que les opérateurs de création habituels permettent d'ajouter des particules dans un système de

particules libres identiques, de même les opérateurs de création $b_{\mathbf{k}}^\dagger$ et $b_{-\mathbf{k}}^\dagger$ peuvent être considérés comme ceux qui ajoutent une “quasi-particule” supplémentaire dans le système physique. Ces quasi-particules ne coïncident pas avec les particules d’un système réellement sans interactions, comme l’illustre l’expression de ces opérateurs de création. Elles fournissent toutefois une base d’états qui permet de raisonner comme en l’absence d’interactions, ce qui introduit un cadre de raisonnement très puissant dans de nombreux domaines de physique.

L’énergie d’une quasi-particule d’impulsion \mathbf{k} est $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$, dont la valeur est donnée en (90). Supposons comme au Complément D_{XV} que le potentiel d’interaction soit un potentiel de portée nulle :

$$W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{97}$$

La relation (16) du Complément B_{XVII} devient alors :

$$V_{\mathbf{k}} = \frac{1}{L^3} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} W_2(\mathbf{r}) = \frac{g}{L^3} \tag{98}$$

de sorte que l’égalité (90) s’écrit :

$$\hbar\omega(\mathbf{k}) = \sqrt{e_k(e_k + 2gm_0)} = \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{k^2(k^2 + k_0^2)} \tag{99}$$

avec :

$$k_0 = \frac{2}{\hbar} \sqrt{mgn_0} = \frac{\sqrt{2}}{\xi} \tag{100}$$

Dans la dernière égalité, ξ est la longueur de relaxation définie en (36). Nous retrouvons ainsi l’égalité (34) du Complément D_{XV}, dont la Figure 1 représente donc le spectre des quasi-particules. Pour les valeurs du module k du vecteur d’onde \mathbf{k} qui sont plus petites que le vecteur d’onde k_0 , le spectre est linéaire, avec une pente qui correspond à la vitesse du son dans le système de bosons ; pour des valeurs plus grandes que k_0 , on retrouve un spectre quadratique semblable à celui de particules libres.

Conclusion

Les calculs de ce complément illustrent l’analogie qui existe entre les phénomènes d’appariement dans des fermions attractifs et des bosons répulsifs. Dans les deux cas, les interactions dynamiques introduisent des corrélations binaires des positions qui diminuent l’énergie potentielle d’interaction du système physique ; les états appariés permettent de rendre compte de cet effet. Dans les deux cas, c’est un phénomène de blocage de phases relatives qui intervient ; mais la nature précise de ce blocage est cependant différente.

Dans les fermions, le gain d’énergie est dû à un effet collectif mettant en jeu les interactions paire-paire et la phase relative de toutes les paires d’états $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$; chacune contribue à créer la valeur du gap Δ qui va influencer toutes les autres – mathématiquement, cela se traduit par la présence d’une double somme sur \mathbf{k} et \mathbf{k}' dans l’énergie. La situation rappelle donc un ferromagnétique, où chaque spin contribue à créer le champ d’échange collectif qui influence ses voisins. Les interactions

étant supposées attractives, le blocage de phase à zéro maximise les interactions paire-paire, et minimise donc l'énergie.

Pour des bosons, la phase qui joue le rôle principal est la phase relative des paires par rapport au réservoir que constituent toutes les particules dans l'état $\mathbf{k} = 0$ (le condensat). Le processus physique qui intervient est celui illustré par la Figure 7 du Complément B_{XVII}, où deux particules émergent du condensat pour former une paire, ou vice-versa – mathématiquement, le terme d'énergie minimisé contient une seule somme sur \mathbf{k} . Le blocage des phases relatives qu'il introduit permet de minimiser la répulsion entre ces paires et le condensat, et donc l'énergie totale. La présence d'un condensat indépendant des paires change donc radicalement la nature du blocage des phases par rapport aux fermions.

Chapitre XVIII

Rappels d'électrodynamique classique

A	Electrodynamique classique	387
A-1	Equations et relations fondamentales	387
A-2	Description des phénomènes dans l'espace réciproque . .	388
A-3	Elimination des champs longitudinaux dans l'expression des grandeurs physiques	393
B	Description du champ transverse comme un ensemble d'oscillateurs harmoniques	396
B-1	Brefs rappels sur l'oscillateur harmonique à une dimension	396
B-2	Variables normales du champ transverse	397
B-3	Modes discrets dans une boîte	402
B-4	Généralisation de la notion de mode	403

Introduction

Dans les trois chapitres précédents, nous avons étudié les ensembles de particules identiques; nous avons montré comment apparaît dans ce cadre la notion d'opérateur de champ quantique. Nous abordons maintenant une nouvelle série de trois chapitres où cette notion de champ quantique est appliquée à un cas particulier important : le champ électromagnétique, composé de bosons identiques appelés "photons". Nous partirons de la constatation qu'en électromagnétisme classique la dynamique des différents modes du champ est exactement semblable à celle d'une série d'oscillateurs harmoniques. Chacun de ces modes peut donc être quantifié par la même méthode que pour un oscillateur harmonique élémentaire constitué d'une seule particule; cette approche possède le grand avantage de la simplicité. Elle demande toutefois d'établir au préalable cette équivalence entre modes du champ électromagnétique classique et oscillateurs harmoniques; c'est le but principal du présent chapitre.

Cet objectif nous amènera à effectuer un certain nombre de rappels d'électromagnétisme classique, afin d'assurer la cohérence de l'exposé. Nous consacrons également un complément à une présentation synthétique du formalisme lagrangien appliqué à ce cas. Toutefois, le lecteur qui serait déjà familier avec ces aspects de l'électromagnétisme classique pourra passer directement au traitement quantique du Chapitre XIX.

Nous commençons au § A par rappeler les équations de Maxwell-Lorentz décrivant l'évolution couplée des champs électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ et magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ et des coordonnées et vitesses des particules servant de source pour ce champ¹. Nous rappelons l'expression d'un certain nombre de constantes du mouvement, comme l'énergie, l'impulsion et le moment cinétique du système global "champ + particules". Les potentiels vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ et scalaire $U(\mathbf{r}, t)$ sont également introduits, ainsi que les transformations de jauge pouvant être effectuées sur ces potentiels.

Nous montrons ensuite qu'il est intéressant d'effectuer une transformation de Fourier spatiale sur les champs. Dans l'espace réciproque, les équations de Maxwell prennent en effet une forme plus simple. En l'absence de particules, ce ne sont plus des équations aux dérivées partielles, mais des équations différentielles en temps. De plus, la notion de champ de vecteurs longitudinal ou transverse prend une signification géométrique claire dans l'espace réciproque². Un champ de vecteurs $\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{k}, t)$ est longitudinal si $\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{k}, t)$ est parallèle à \mathbf{k} en tout point \mathbf{k} de l'espace réciproque, transverse si $\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{k}, t)$ est perpendiculaire à \mathbf{k} en tout point \mathbf{k} . Nous montrons que deux des quatre équations de Maxwell fixent la valeur des champs électrique et magnétique longitudinaux alors que les deux autres décrivent l'évolution des champs transverses. Il apparaît notamment que le champ électrique longitudinal est tout simplement le champ électrostatique de Coulomb créé par les particules chargées. Ce n'est donc pas une variable de champ indépendante puisqu'il est fonction des seules coordonnées des particules³. Le choix de la jauge de Coulomb revient par ailleurs à prendre le potentiel vecteur longitudinal égal à zéro, ce qui permet finalement d'éliminer les champs longitudinaux des expressions de toutes les grandeurs physiques.

Dans le § B, nous montrons l'équivalence qui existe entre le champ de rayonnement et un ensemble d'oscillateurs harmoniques à une dimension. Les équations de Maxwell des champs transverses permettent en effet d'introduire des combinaisons linéaires des potentiels vecteurs et champs électriques transverses qui, en l'absence de particules et pour chaque vecteur d'onde \mathbf{k} , évoluent en $e^{-i\omega t}$ où $\omega = ck$. Ces variables, appelées *variables normales*, décrivent donc les modes propres de vibration du champ libre. La dynamique de chacun de ces modes propres est analogue à celle d'un oscillateur harmonique à une dimension, la variable normale du mode apparaissant comme l'équivalent de la combinaison linéaire de la position et de la vitesse de l'oscillateur associé qui devient, lors de la quantification, l'opérateur d'annihilation bien connu dans la théorie quantique de l'oscillateur harmonique. C'est le remplacement des variables normales et de leurs complexes conjuguées par des opérateurs d'annihilation et de création qui permettra, dans le Chapitre XIX, d'obtenir l'expression des divers opérateurs de la théorie quantique.

1. Nous supposons ici que les vitesses des particules sont faibles devant la vitesse de la lumière, de sorte que nous pourrions nous limiter à une description non relativiste.

2. Nous désignons par $\tilde{G}(\mathbf{k})$ la transformée de Fourier spatiale de $G(\mathbf{r})$, le symbole "tilde" permettant de distinguer clairement les deux fonctions dans l'espace ordinaire et l'espace réciproque.

3. Le champ magnétique longitudinal est quant à lui nul.

A. Electrodynamique classique

A-1. Equations et relations fondamentales

A-1-a. Equations de Maxwell

Les équations de Maxwell dans le vide et en présence de sources sont au nombre de quatre :

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A-1a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{A-1b})$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A-1c})$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A-1d})$$

Elles donnent la divergence et le rotationnel des champs électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ et magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$. Les densités de charge $\rho(\mathbf{r}, t)$ et de courant $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ qui apparaissent dans ces équations s'expriment, à la limite non relativiste, en fonction des positions $\mathbf{r}_a(t)$ et des vitesses $\mathbf{v}_a(t) = d\mathbf{r}_a(t)/dt$ des diverses particules a du système, de masses m_a et de charges q_a :

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_a q_a \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)] \quad (\text{A-2a})$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_a q_a \mathbf{v}_a(t) \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)] \quad (\text{A-2b})$$

A-1-b. Equations de Lorentz

Les équations de Lorentz décrivent la dynamique de chaque particule a sous l'effet des forces électrique et magnétique exercées sur cette particule par les champs $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$:

$$m_a \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r}_a(t) = q_a [\mathbf{E}(\mathbf{r}_a(t), t) + \mathbf{v}_a(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_a(t), t)] \quad (\text{A-3})$$

Les évolutions des particules et des champs sont couplées : les particules évoluent sous l'effet des forces exercées sur elles par les champs, et jouent elles-mêmes le rôle de sources pour l'évolution des champs.

A-1-c. Constantes du mouvement

Les définitions (A-2a) de $\rho(\mathbf{r}, t)$ et (A-2b) de $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ entraînent l'équation de continuité :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{A-4})$$

qui implique l'invariance au cours du temps de la charge totale du système de particules :

$$Q = \int d^3r \rho(\mathbf{r}, t) = \sum_a q_a \quad (\text{A-5})$$

D'autres constantes du mouvement existent : l'énergie totale H , l'impulsion totale \mathbf{P} et le moment cinétique total \mathbf{J} du système champ + particules, donnés respectivement par :

$$H = \sum_a \frac{1}{2} m_a \mathbf{v}_a^2(t) + \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t) + c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r}, t)] \quad (\text{A-6a})$$

$$\mathbf{P} = \sum_a m_a \mathbf{v}_a(t) + \varepsilon_0 \int d^3r \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A-6b})$$

$$\mathbf{J} = \sum_a \mathbf{r}_a(t) \times m_a \mathbf{v}_a(t) + \varepsilon_0 \int d^3r \mathbf{r} \times [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] \quad (\text{A-6c})$$

On peut en effet vérifier, à partir des équations (A-1) et (A-3), que les dérivées par rapport au temps de H , \mathbf{P} et \mathbf{J} sont nulles (pour H et \mathbf{P} , voir par exemple exercice 1 et son corrigé dans le Complément C_I de [15]).

A-1-d. Potentiels scalaire et vecteur ; transformations de jauge

Comme nous l'avons déjà vu dans le Complément H_{III}, les champs $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ peuvent toujours être écrits sous la forme :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A-7a})$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A-7b})$$

où $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ et $U(\mathbf{r}, t)$ sont les potentiels vecteur et scalaire constituant une *jauge*. Lorsque $\chi(\mathbf{r}, t)$ est une fonction arbitraire de \mathbf{r} et de t , toute transformation de ces potentiels définie par les relations :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \Rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla \chi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A-8a})$$

$$U(\mathbf{r}, t) \Rightarrow U'(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A-8b})$$

conduit à la même expression de $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$; les mêmes champs physiques peuvent donc être représentés par plusieurs potentiels $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ et $U(\mathbf{r}, t)$ différents. La transformation (A-8) associée à la fonction $\chi(\mathbf{r}, t)$ est appelée *transformation de jauge*.

Les relations (A-8) laissent une flexibilité sur le choix de la jauge $\{\mathbf{A}, U\}$, ce qui permet d'introduire une condition supplémentaire. La jauge de Coulomb, que nous utiliserons dans ce chapitre et les suivants, est définie par la condition :

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{A-9})$$

Nous donnerons plus loin une interprétation géométrique de la condition (A-9) dans l'espace réciproque.

A-2. Description des phénomènes dans l'espace réciproque

L'utilisation de la transformation de Fourier permet de mettre les équations de l'électrodynamique sous une forme qui est très commode pour la suite des calculs.

A-2-a. Transformation de Fourier spatiale

Introduisons la transformée de Fourier du champ électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$:

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{A-10})$$

permettant d'exprimer $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ sous la forme :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{A-11})$$

Des expressions analogues peuvent être écrites pour toutes les grandeurs physiques introduites plus haut : champ magnétique, densités de courant et de charge, potentiels vecteur et scalaire.

Il sera utile pour la suite de rappeler l'identité de Parseval-Plancherel (Appendice I, § 2-c) exprimant l'égalité du produit scalaire de deux fonctions prises dans l'espace des positions ou dans l'espace réciproque⁴ :

$$\int d^3r F^*(\mathbf{r})G(\mathbf{r}) = \int d^3k \tilde{F}^*(\mathbf{k})\tilde{G}(\mathbf{k}) \quad (\text{A-12})$$

et le fait que, dans l'espace réciproque, le produit de deux fonctions est la transformée de Fourier du produit de convolution de ces deux fonctions dans l'espace des positions :

$$\tilde{F}(\mathbf{k})\tilde{G}(\mathbf{k}) \stackrel{\text{TF}}{\Leftrightarrow} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r' F(\mathbf{r}')G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{A-13})$$

A-2-b. Equations de Maxwell dans l'espace réciproque

Les équations de Maxwell prennent une forme plus simple dans l'espace réciproque et permettent d'identifier clairement les différences de nature entre les composantes longitudinale et transverse des divers champs. Tout champ de vecteurs $\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{k}, t)$ peut être décomposé en un champ longitudinal $\tilde{\mathbf{V}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t)$, parallèle en tout point \mathbf{k} au vecteur \mathbf{k} , et un champ transverse $\tilde{\mathbf{V}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ perpendiculaire à \mathbf{k} :

$$\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{k}, t) = \tilde{\mathbf{V}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t) + \tilde{\mathbf{V}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-14})$$

avec :

$$\tilde{\mathbf{V}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t) = \boldsymbol{\kappa} \left(\boldsymbol{\kappa} \cdot \tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{k}, t) \right) = \mathbf{k} \left(\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{k}, t) \right) / k^2 \quad (\text{A-15a})$$

$$\tilde{\mathbf{V}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = \tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{k}, t) - \tilde{\mathbf{V}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-15b})$$

où $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}/k$ est le vecteur unitaire le long de \mathbf{k} .

Comme l'opérateur ∇ dans l'espace des positions correspond à l'opérateur $i\mathbf{k}$ dans l'espace réciproque, les équations de Maxwell (A-1) deviennent dans l'espace

4. Nous appelons "espace des positions" celui des vecteurs \mathbf{r} (espace ordinaire), et "espace réciproque" celui des vecteurs d'onde \mathbf{k} .

réciroque :

$$i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-16a})$$

$$i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) = 0 \quad (\text{A-16b})$$

$$i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-16c})$$

$$i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) + \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \tilde{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-16d})$$

Compte tenu des définitions (A-15) des composantes longitudinales et transverses d'un champ de vecteurs, les deux premières équations (A-16a) et (A-16b) fixent les parties longitudinales projections des champs $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t)$ et $\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t)$ sur \mathbf{k} :

$$\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t) = -\frac{i}{\varepsilon_0} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) \frac{\mathbf{k}}{k^2} \quad (\text{A-17a})$$

$$\tilde{\mathbf{B}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t) = \mathbf{0} \quad (\text{A-17b})$$

Les deux dernières équations (A-16c) et (A-16d) donnent les vitesses de variation $\partial \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t)/\partial t$ et $\partial \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t)/\partial t$ des champs $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t)$ et $\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t)$. Ce sont donc les équations du mouvement de ces champs. En l'absence de sources ($\tilde{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t) = \mathbf{0}$), c'est-à-dire pour un champ que nous appellerons "libre", ce sont des équations différentielles en temps, et non plus aux dérivées partielles comme c'est le cas dans l'espace des positions.

A-2-c. Champs électrique et magnétique longitudinaux

L'équation (A-17b) montre que le champ magnétique longitudinal $\tilde{\mathbf{B}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t)$ est nul. L'équation (A-17a) donne $\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t)$ sous la forme d'un produit de deux fonctions de \mathbf{k} , $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, t)$ et $-i\mathbf{k}/\varepsilon_0 k^2$ dont les transformées de Fourier s'écrivent :

$$\tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) \xleftrightarrow{\text{TF}} \rho(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A-18a})$$

$$-\frac{i}{\varepsilon_0} \frac{\mathbf{k}}{k^2} \xleftrightarrow{\text{TF}} \frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi\varepsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r^3} \quad (\text{A-18b})$$

L'utilisation de l'équation (A-13) conduit alors à :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3r' \rho(\mathbf{r}', t) \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \\ &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_a q_a \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)|^3} \end{aligned} \quad (\text{A-19})$$

Ainsi, le champ électrique longitudinal à l'instant t coïncide avec le champ de Coulomb produit par la distribution de charge $\rho(\mathbf{r}, t)$, calculé comme si cette distribution était statique et figée à cet instant t .

Remarque

Le fait que le champ électrique longitudinal suive instantanément l'évolution de la distribution de charge $\rho(\mathbf{r}, t)$ ne doit pas faire croire à des interactions à distance se propageant à une vitesse infinie. Il faut aussi tenir compte de la contribution du

champ transverse, car seul le champ électrique total $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\parallel} + \mathbf{E}_{\perp}$ possède un sens physique. On peut montrer que le champ électrique transverse a, lui aussi, une composante instantanée qui compense exactement celle du champ longitudinal, de sorte que le champ total est toujours retardé (en $t - r/c$), les interactions électromagnétiques se propageant à la vitesse de la lumière c (voir exercice 3 et son corrigé dans le Complément C₁ de la référence [15]).

Les résultats précédents montrent que les champs longitudinaux ne sont pas des grandeurs indépendantes : ils sont, soit nuls (cas du champ magnétique longitudinal), soit reliés simplement aux coordonnées $\mathbf{r}_a(t)$ des particules (cas du champ électrique longitudinal dont l'expression est donnée par (A-19)).

A-2-d. Equations d'évolution des champs transverses

Après avoir montré que les deux premières équations de Maxwell fixent la partie longitudinale des champs, considérons maintenant les deux dernières équations (A-16c) et (A-16d) et prenons les composantes transverses des deux membres de chacune d'elles. Comme $\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \mathbf{k} \times \mathbf{E}_{\perp}$, elles se ré-écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) = -i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-20a})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = ic^2 \mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) - \frac{1}{\varepsilon_0} \tilde{\mathbf{j}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-20b})$$

qui fournissent l'évolution temporelle des champs transverses $\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ et $\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t)$.

Remarque

On peut également étudier la projection longitudinale des deux équations de Maxwell (A-16c) et (A-16d). Pour la première c'est très simple, puisque les deux membres de (A-16c) sont transverses ; leur projection longitudinale est donc nulle. Quant à (A-16d), elle conduit à :

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t) + \frac{1}{\varepsilon_0} \tilde{\mathbf{j}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t) = 0. \quad (\text{A-21})$$

Prenons le produit scalaire avec \mathbf{k} des deux membres de cette équation. Compte tenu de (A-17a) et du fait que $\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{j}} = \mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{j}}_{\parallel}$, il vient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) + i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t) = 0 \quad (\text{A-22})$$

qui n'est autre que l'équation de continuité (A-4) dans l'espace réciproque, et n'apporte donc rien de nouveau.

A-2-e. Potentiels

Les relations (A-7a) et (A-7b) entre champs et potentiels deviennent, dans l'espace réciproque :

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) = -i\mathbf{k}\tilde{U}(\mathbf{k}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-23a})$$

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) = i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-23b})$$

et les égalités (A-8a) et (A-8b) définissant une transformation de jauge :

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) \rightarrow \tilde{\mathbf{A}}'(\mathbf{k}, t) = \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) + i\mathbf{k}\tilde{F}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-24a})$$

$$\tilde{U}(\mathbf{k}, t) \rightarrow \tilde{U}'(\mathbf{k}, t) = \tilde{U}(\mathbf{k}, t) - \frac{\partial}{\partial t}\tilde{F}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-24b})$$

où $\tilde{F}(\mathbf{k}, t)$ est la transformée de Fourier de $\chi(\mathbf{r}, t)$.

Comme le dernier terme de (A-24a) est un vecteur longitudinal, il est clair qu'une transformation de jauge ne change pas la partie transverse $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$; cette dernière définit donc un champ physique, invariant de jauge :

$$\tilde{\mathbf{A}}'_{\perp}(\mathbf{k}, t) = \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-25})$$

Comme $\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}_{\parallel} = \mathbf{0}$, la projection transverse des relations (A-23a) et (A-23b) conduit aux équations :

$$\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = -\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-26a})$$

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) = i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-26b})$$

Notons que l'équation (A-26b) permet d'exprimer $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ en fonction de $\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t)$. En prenant le produit vectoriel avec \mathbf{k} des deux membres de cette équation, et en utilisant l'identité :

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})\mathbf{b} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{c}, \quad (\text{A-27})$$

et le fait que $\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = 0$, on obtient :

$$\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = \frac{i}{k^2} \left(\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) \right) \quad (\text{A-28})$$

Cette équation ainsi que l'équation (A-26a) permettent de ré-écrire les deux équations d'évolution des champs transverses (A-20a) et (A-20b) sous une forme qui ne fait apparaître que $\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ et $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = -\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-29a})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = c^2 k^2 \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) - \frac{1}{\varepsilon_0} \tilde{\mathbf{j}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-29b})$$

En l'absence de sources ($\tilde{\mathbf{j}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = \mathbf{0}$), on obtient deux équations d'évolution couplées pour les champs transverses $\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ et $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$. Elles seront utiles plus loin pour l'introduction des variables normales du champ et la démonstration de l'équivalence du champ transverse avec un ensemble d'oscillateurs harmoniques.

Équation d'évolution du potentiel vecteur transverse

L'équation d'évolution de $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}$ peut être obtenue en remplaçant dans (A-29b) $\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}$ par $-\partial\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}/\partial t$. On obtient ainsi :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + c^2 k^2 \right] \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0} \tilde{\mathbf{j}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-30})$$

qui s'écrit dans l'espace des positions :

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right] \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \mathbf{j}_{\perp}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A-31})$$

A-2-f. Jauge de Coulomb

La condition $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0$, définissant en (A-9) la jauge de Coulomb, devient dans l'espace réciproque :

$$i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) = 0 \quad \longleftrightarrow \quad \tilde{A}_{\parallel}(\mathbf{k}, t) = 0 \quad (\text{A-32})$$

Dans la jauge de Coulomb, le potentiel vecteur longitudinal est donc nul ; reste le potentiel vecteur transverse, dont nous avons vu plus haut que c'est un champ physique.

Que peut-on dire du potentiel scalaire U dans la jauge de Coulomb ? Prenons la partie longitudinale des deux membres de l'équation (A-23a). Comme le dernier terme du second membre est transverse en jauge de Coulomb, on obtient $\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t) = -i\mathbf{k}\tilde{U}(\mathbf{k}, t)$, ce qui, dans l'espace des positions, se traduit par $\mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r}, t) = -\nabla U(\mathbf{r}, t)$. Le potentiel scalaire est donc le potentiel dont dérive le champ électrique longitudinal. L'équation (A-19) montre alors que, à une constante près, $U(\mathbf{r}, t)$ est égal à :

$$U(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_a q_a \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)|} \quad (\text{A-33})$$

c'est-à-dire encore au potentiel coulombien créé par la distribution de charges.

Jauge de Lorentz

Dans ce chapitre et le suivant, nous utiliserons principalement la jauge de Coulomb. Une autre jauge couramment adoptée, notamment dans les formulations manifestement covariantes de l'électrodynamique, est la *jauge de Lorentz* définie par la condition :

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} U(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{A-34})$$

équation qui s'écrit encore, en notations covariantes :

$$\sum_{\mu} \partial_{\mu} A^{\mu} = 0 \quad (\text{A-35})$$

La condition définissant la jauge de Lorentz garde donc la même forme dans tous les référentiels de Lorentz, ce qui n'est pas le cas pour la jauge de Coulomb (puisque un champ transverse de divergence nulle dans un référentiel n'est plus nécessairement transverse dans un autre référentiel en relativité). La jauge de Coulomb a néanmoins l'avantage de permettre d'identifier, dans un référentiel donné, les variables du champ réellement indépendantes.

A-3. Elimination des champs longitudinaux dans l'expression des grandeurs physiques

Pour la suite de la discussion, il sera utile d'éliminer les champs longitudinaux de l'énergie totale H et de l'impulsion totale données par les équations (A-6a) et (A-6b). Ceci permet de ne faire apparaître dans les grandeurs physiques que les variables réellement indépendantes, coordonnées et vitesses des particules, champs transverse.

A-3-a. Énergie totale

Commençons par éliminer le champ électrique longitudinal du dernier terme de l'expression (A-6a). Utilisant l'égalité de Parseval-Plancherel (A-12) et le fait que $\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = 0$, on peut ré-écrire ce dernier terme sous la forme :

$$\frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r [\mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t) + c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r}, t)] = H_{\text{long}} + H_{\text{trans}} \quad (\text{A-36})$$

où :

$$H_{\text{long}} = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3k \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-37a})$$

$$H_{\text{trans}} = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3k \left[\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) + c^2 \tilde{\mathbf{B}}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) \right] \quad (\text{A-37b})$$

Dans (A-37a), remplaçons $\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t)$ par l'expression (A-17a). Il vient, compte tenu de (A-12) et (A-13) :

$$\begin{aligned} H_{\text{long}} &= \frac{1}{2\varepsilon_0} \int d^3k \frac{\tilde{\rho}^*(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t)}{k^2} \\ &= \frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \iint d^3r d^3r' \frac{\tilde{\rho}(\mathbf{r}, t) \tilde{\rho}(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ &= \sum_a h_{\text{Coul}}^a + \frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \sum_{a \neq b} \frac{q_a q_b}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} = V_{\text{Coul}} \end{aligned} \quad (\text{A-38})$$

L'énergie du champ longitudinal est donc égale à l'énergie d'interaction électrostatique de Coulomb V_{Coul} de la distribution de charge $\rho(\mathbf{r}, t)$. En plus de l'énergie d'interaction de Coulomb de particules différentes a et b , V_{Coul} contient l'énergie h_{Coul}^a du champ de Coulomb de chaque particule a , qui diverge pour des particules ponctuelles.

L'expression (A-37b) de H_{trans} peut être réécrite en fonction des variables $\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = -\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ et $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ introduites plus haut pour le champ transverse :

$$H_{\text{trans}} = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3k \left[\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) + \omega^2 \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \right] \quad (\text{A-39})$$

Finalement, l'énergie du système global champ + particules peut être réécrite sous la forme :

$$H = \frac{1}{2} \sum_a m_a \dot{\mathbf{r}}_a^2(t) + V_{\text{Coul}} + H_{\text{trans}} \quad (\text{A-40})$$

où nous avons utilisé la notation simplifiée $\dot{\mathbf{r}}_a(t) = d\mathbf{r}_a(t)/dt = \mathbf{v}_a(t)$. C'est la somme de l'énergie cinétique des particules, de leur énergie de Coulomb et de l'énergie du champ transverse.

A-3-b. Impulsion totale

Des calculs analogues peuvent être menés pour l'impulsion totale \mathbf{P} . La contribution du champ contenue dans le dernier terme de (A-6b) s'écrit :

$$\varepsilon_0 \int d^3k \tilde{\mathbf{E}}^*(\mathbf{k}, t) \times \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) = \underbrace{\varepsilon_0 \int d^3k \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}^*(\mathbf{k}, t) \times \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t)}_{\mathbf{P}_{\text{long}}} + \underbrace{\varepsilon_0 \int d^3k \tilde{\mathbf{E}}_{\perp}^*(\mathbf{k}, t) \times \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t)}_{\mathbf{P}_{\text{trans}}} \quad (\text{A-41})$$

où nous avons séparé les contributions à \mathbf{P} des composantes longitudinale et transverse du champ électrique⁵. Si l'on utilise (A-17a) et (A-26b), on obtient, compte tenu de l'identité (A-27) :

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\text{long}} &= \varepsilon_0 \int d^3k \frac{i\tilde{\rho}^*(\mathbf{k}, t)}{\varepsilon_0} \frac{\mathbf{k}}{k^2} \times (\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)) \\ &= \int d^3k \tilde{\rho}^*(\mathbf{k}, t) \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \end{aligned} \quad (\text{A-42})$$

puisque $\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = 0$, c'est-à-dire encore :

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\text{long}} &= \int d^3k \tilde{\rho}^*(\mathbf{k}, t) \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = \int d^3r \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}, t) \\ &= \sum_a q_a \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_a, t). \end{aligned} \quad (\text{A-43})$$

Comme plus haut en (A-39), on peut ré-écrire l'expression de $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ en fonction des variables $\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = -\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ et $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ du champ transverse :

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\text{trans}} &= -\varepsilon_0 \int d^3k \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}^*(\mathbf{k}, t) \times [\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)] \\ &= -i\varepsilon_0 \int d^3k \mathbf{k} [\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)] \end{aligned} \quad (\text{A-44})$$

L'impulsion du système total champ + particules peut donc être réécrite sous la forme :

$$\mathbf{P} = \sum_a [m_a \dot{\mathbf{r}}_a(t) + q_a \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_a, t)] + \mathbf{P}_{\text{trans}} \quad (\text{A-45})$$

Introduisons enfin la quantité :

$$\mathbf{p}_a(t) = m_a \dot{\mathbf{r}}_a(t) + q_a \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_a, t) \quad (\text{A-46})$$

Nous verrons plus loin que, dans l'électrodynamique en jauge de Coulomb, $\mathbf{p}_a(t)$ est le moment conjugué de $\mathbf{r}_a(t)$, qui diffère donc de la quantité de mouvement $m_a \dot{\mathbf{r}}_a(t)$.

5. La notation \mathbf{P}_{long} ne doit pas faire croire que \mathbf{P}_{long} est lui-même un champ de vecteurs longitudinal : c'est en réalité le vecteur qui donne la contribution du champ électrique longitudinal au vecteur impulsion ; la même remarque s'applique à $\mathbf{P}_{\text{trans}}$.

Exprimées en fonction de $\mathbf{p}_a(t)$, l'énergie totale (A-40) et l'impulsion totale (A-45) s'écrivent :

$$H = \frac{1}{2m_a} \sum_a [\mathbf{p}_a - q_a \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}_a, t)]^2 + V_{\text{Coul}} + H_{\text{trans}} \quad (\text{A-47})$$

$$\mathbf{P} = \sum_a \mathbf{p}_a(t) + \mathbf{P}_{\text{trans}} \quad (\text{A-48})$$

où H_{trans} et $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ apparaissent dans les équations (A-37b) et (A-41). Nous verrons que H coïncide avec l'hamiltonien en jauge de Coulomb du système total champ + particules.

A-3-c. Moment cinétique total

Des calculs analogues aux précédents, que nous ne détaillerons pas ici⁶, permettent de montrer que la contribution du champ électrique longitudinal au moment cinétique total est égale à :

$$\mathbf{J}_{\text{long}} = \varepsilon_0 \int d^3r \mathbf{r} \times (\mathbf{E}_\parallel \times \mathbf{B}) = \sum_a q_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}_a) \quad (\text{A-49})$$

Si l'on regroupe \mathbf{J}_{long} et le moment cinétique des particules, on obtient, compte tenu de (A-46) :

$$\sum_a \mathbf{r}_a \times m_a \dot{\mathbf{r}}_a + \mathbf{J}_{\text{long}} = \sum_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a \quad (\text{A-50})$$

de sorte qu'on peut finalement écrire :

$$\mathbf{J} = \sum_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a + \mathbf{J}_{\text{trans}} \quad (\text{A-51})$$

où :

$$\mathbf{J}_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3r [\mathbf{r} \times (\mathbf{E}_\perp \times \mathbf{B})] \quad (\text{A-52})$$

B. Description du champ transverse comme un ensemble d'oscillateurs harmoniques

B-1. Brefs rappels sur l'oscillateur harmonique à une dimension

L'énergie d'un oscillateur harmonique de fréquence angulaire ω s'écrit :

$$E = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (\text{B-1})$$

où \dot{x} la vitesse de l'oscillateur :

$$\frac{d}{dt} x = \dot{x} \quad (\text{B-2})$$

6. Ces calculs peuvent être trouvés dans le § 1 du Complément B_I de [15].

Cette vitesse obéit à :

$$\frac{d}{dt} \dot{x} = -\omega^2 x \quad (\text{B-3})$$

de sorte que l'équation d'évolution de x est :

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \quad (\text{B-4})$$

Il en découle que $x(t)$ évolue comme une combinaison linéaire (réelle) de $\cos(\omega t)$ et $\sin(\omega t)$.

L'état dynamique de l'oscillateur harmonique classique est défini à chaque instant par deux variables réelles $x(t)$ et $\dot{x}(t)$. Il est souvent commode de les combiner en une seule variable complexe $\alpha(t)$ en posant :

$$\alpha(t) = C \left[x(t) + i \frac{\dot{x}(t)}{\omega} \right] \quad (\text{B-5})$$

où C est une constante (indépendante du temps) arbitraire. On déduit de (B-2) et (B-3) que $\alpha(t)$ obéit à l'équation différentielle du premier ordre :

$$\dot{\alpha} = C(\dot{x} - i\omega x) = -i\omega C \left(x + i \frac{\dot{x}}{\omega} \right) = -i\omega \alpha \quad (\text{B-6})$$

La nouvelle variable $\alpha(t)$ varie donc simplement en $e^{-i\omega t}$.

On peut inverser le système formé par l'équation (B-5) et l'équation complexe conjuguée donnant α^* pour calculer x et \dot{x} en fonction de α et α^* . En reportant les expressions ainsi obtenues dans l'équation (B-1) donnant l'énergie E , on obtient après un calcul simple⁷ :

$$E = \frac{m\omega^2}{4C^2} (\alpha^* \alpha + \alpha \alpha^*) \quad (\text{B-7})$$

On peut choisir la constante C de manière que :

$$\frac{m\omega^2}{4C^2} = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (\text{B-8})$$

Alors, après quantification, on obtient l'opérateur hamiltonien :

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \quad (\text{B-9})$$

qui est l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique⁸.

B-2. Variables normales du champ transverse

B-2-a. Modes propres de vibration du champ transverse libre

Dans l'espace réciproque, l'expression (A-39) de l'énergie H_{trans} du champ transverse libre est une somme de fonctions quadratiques de $\tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t)$ et $\tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t)$.

7. En vue de la quantification où α et α^* sont remplacés par des opérateurs \hat{a} et \hat{a}^\dagger qui ne commutent pas, nous conservons l'ordre de α et α^* tel qu'il apparaît dans les calculs.

8. Si \hat{x} et \hat{p} obéissent à la relation de commutation canonique $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, le choix (B-8) pour C entraîne également la relation de commutation $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$.

Pour chaque valeur de \mathbf{k} , on a donc un hamiltonien d'oscillateur harmonique. Les évolutions des diverses composantes de Fourier spatiales du champ transverse sont donc découplées les unes des autres. L'avantage de passer dans l'espace réciproque apparaît donc clairement : il permet d'identifier quels sont, en l'absence de sources, les modes propres de vibration du champ.

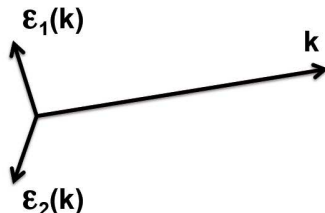


FIGURE 1 – Pour chaque vecteur \mathbf{k} , les champs transverse peuvent avoir deux polarisations caractérisées par des vecteurs unitaires $\boldsymbol{\varepsilon}_1(\mathbf{k})$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_2(\mathbf{k})$ perpendiculaires entre eux et perpendiculaires à \mathbf{k} .

En fait, pour chaque \mathbf{k} , le champ vectoriel transverse peut avoir deux polarisations⁹ caractérisées par les vecteurs unitaires $\boldsymbol{\varepsilon}_1(\mathbf{k})$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_2(\mathbf{k})$, perpendiculaires à \mathbf{k} et perpendiculaires entre eux, de sorte que l'on peut écrire, par exemple pour $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$:

$$\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = \tilde{A}_{\perp\boldsymbol{\varepsilon}_1(\mathbf{k})}(\mathbf{k}, t) \boldsymbol{\varepsilon}_1(\mathbf{k}) + \tilde{A}_{\perp\boldsymbol{\varepsilon}_2(\mathbf{k})}(\mathbf{k}, t) \boldsymbol{\varepsilon}_2(\mathbf{k}) = \sum_{\boldsymbol{\varepsilon}_i(\mathbf{k})} \tilde{A}_{\perp\boldsymbol{\varepsilon}_i(\mathbf{k})}(\mathbf{k}, t) \boldsymbol{\varepsilon}_i(\mathbf{k}) \quad (\text{B-10})$$

avec :

$$\tilde{A}_{\perp\boldsymbol{\varepsilon}_i(\mathbf{k})}(\mathbf{k}, t) = \boldsymbol{\varepsilon}_i(\mathbf{k}) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{B-11})$$

L'ensemble $\{\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}_i(\mathbf{k})\}$ définit ce que nous appellerons dans tout ce chapitre un *mode* du champ libre. Les modes $\{\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}_i(\mathbf{k})\}$ sont les modes propres de vibration du champ libre, évoluant à la fréquence :

$$\omega = ck \quad (\text{B-12})$$

Pour alléger les notations, nous écrirons la dernière somme de (B-10) sous une forme plus compacte :

$$\sum_{\boldsymbol{\varepsilon}_i(\mathbf{k})} \tilde{A}_{\perp\boldsymbol{\varepsilon}_i(\mathbf{k})}(\mathbf{k}, t) \boldsymbol{\varepsilon}_i(\mathbf{k}) \equiv \sum_{\boldsymbol{\varepsilon}} \tilde{A}_{\perp\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{k}, t) \boldsymbol{\varepsilon} \quad (\text{B-13})$$

9. Nous choisissons ici des vecteurs $\boldsymbol{\varepsilon}_1(\mathbf{k})$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_2(\mathbf{k})$ réels qui correspondent à des polarisations linéaires ; le choix des deux polarisations de base est d'ailleurs arbitraire dans la mesure où une rotation quelconque autour de \mathbf{k} peut leur être appliquée. On peut également choisir une base de deux vecteurs complexes, cas auquel ils définissent des polarisations circulaires ou elliptiques ; cet autre choix de base est utile pour discuter le spin du champ électromagnétique (Complément Bxix, § 3).

Ré-écrivons l'expression (A-39) de \tilde{H}_{trans} en faisant apparaître les composantes des champs $\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ et $\dot{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ sur les vecteurs polarisations. Il vient :

$$H_{\text{trans}} = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3k \sum_{\varepsilon} \left[\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t) \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t) + \omega^2 \tilde{\mathbf{A}}_{\perp\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t) \tilde{\mathbf{A}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \right]. \quad (\text{B-14})$$

Les composantes sur les deux polarisations ε sont des variables dynamiques (coordonnées généralisées et vitesses généralisées) réellement indépendantes. Ce n'est pas le cas des composantes cartésiennes $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp i}(\mathbf{k}, t)$ et $\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp i}(\mathbf{k}, t)$ (avec $i = x, y, z$), à cause de la condition de transversalité. Par exemple, les composantes $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp i}(\mathbf{k}, t)$ doivent obéir à $\sum_i k_i \tilde{\mathbf{A}}_{\perp i} = 0$.

Contraintes des variables dynamiques dans l'espace réciproque

La condition $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t) = \tilde{\mathbf{A}}_{\perp\varepsilon}^*(-\mathbf{k}, t)$ découle de la réalité des champs dans l'espace réel. La connaissance des $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t)$ dans tout l'espace réciproque entraîne celle des $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)$. Les variables $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t)$ et $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)$ ne sont donc réellement indépendantes que dans un demi-espace réciproque.

B-2-b. Définition des variables normales, cas du champ libre

Supposons tout d'abord le champ libre ($\tilde{\mathbf{j}}_{\perp} = \mathbf{0}$), et remplaçons dans les équations (A-29a) et (A-29b) le champ $\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ par $-\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$. Compte tenu du fait que $\omega = kc$, on obtient deux équations exactement semblables à celles d'un oscillateur harmonique (B-2) et (B-3), où $\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ remplace $x(t)$. Cette analogie suggère d'introduire, comme en (B-5), une nouvelle variable transverse :

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{k}, t) &= \mathcal{N}(k) \left[\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) + \frac{i}{\omega} \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \right] \\ &= i\mathcal{N}(k) \left[\frac{\mathbf{k}}{k^2} \times \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) - \frac{1}{\omega} \tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \right] \end{aligned} \quad (\text{B-15})$$

où $\mathcal{N}(k)$ est une constante réelle pour le moment arbitraire qui peut dépendre de k (sa valeur sera choisie au début du chapitre suivant). L'équation d'évolution de $\alpha(\mathbf{k}, t)$ se déduit de sa définition et de (A-29b) et s'écrit :

$$\dot{\alpha}(\mathbf{k}, t) + i\omega\alpha(\mathbf{k}, t) = 0 \quad (\text{B-16})$$

A la différence de $\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ qui, d'après (A-30), obéit à une équation du second ordre, cette nouvelle variable $\alpha(\mathbf{k}, t)$ obéit à une équation du premier ordre. C'est une variable complexe qui évolue en $e^{-i\omega t}$, et non comme une superposition linéaire de $e^{-i\omega t}$ et $e^{+i\omega t}$ comme c'est le cas de la variable $\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$.

Il sera utile pour la suite de considérer l'équation complexe conjuguée de (B-15) :

$$\begin{aligned} \alpha^*(\mathbf{k}, t) &= \mathcal{N}(k) \left[\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}^*(\mathbf{k}, t) - \frac{i}{\omega} \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}^*(\mathbf{k}, t) \right] \\ &= \mathcal{N}(k) \left[\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(-\mathbf{k}, t) - \frac{i}{\omega} \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}(-\mathbf{k}, t) \right] \end{aligned} \quad (\text{B-17})$$

Pour passer de la première à la deuxième ligne de (B-17), nous avons utilisé la réalité de \mathbf{A}_\perp dans l'espace réel qui entraîne que :

$$\tilde{\mathbf{A}}_\perp^*(\mathbf{k}, t) = \tilde{\mathbf{A}}_\perp(-\mathbf{k}, t) \quad (\text{B-18})$$

ainsi qu'une relation analogue pour $\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_\perp$.

Les variables transverses $\alpha(\mathbf{k}, t)$ et $\alpha^*(\mathbf{k}, t)$ sont appelées *variables normales* du champ transverse. Nous verrons dans le chapitre suivant que, lors de la quantification, elles deviennent des opérateurs d'annihilation et de création de photons.

B-2-c. Equation d'évolution des variables normales en présence de sources

Si $\tilde{\mathbf{j}}_\perp$ n'est pas nul, nous continuerons à définir les variables normales $\alpha(\mathbf{k}, t)$ par les équations (B-15), mais il faut maintenant garder dans l'équation (A-29b) le terme en $\tilde{\mathbf{j}}_\perp(\mathbf{k}, t)$ du second membre. La même transformation que celle qui permet de passer des équations (A-29a) et (A-29b) à (B-16) conduit à une nouvelle équation d'évolution en présence de sources :

$$\dot{\alpha}(\mathbf{k}, t) + i\omega\alpha(\mathbf{k}, t) = \frac{i\mathcal{N}(k)}{\varepsilon_0 \omega} \tilde{\mathbf{j}}_\perp(\mathbf{k}, t) \quad (\text{B-19})$$

Elle est strictement équivalente aux équations de Maxwell des champs transverses ; il suffit en effet de prendre la dérivée temporelle des équations (B-22a) et (B-22b) données plus loin et d'utiliser (B-19) pour obtenir les équations d'évolution (A-29a) et (A-29b) de ces champs.

Indépendance de variables normales

Un autre intérêt des variables normales est qu'elles sont indépendantes : il n'existe pas de relation entre $\alpha(\mathbf{k}, t)$ et $\alpha^*(-\mathbf{k}, t)$ comme celle qui existe entre $\tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t)$ et $\tilde{\mathbf{A}}_\perp^*(-\mathbf{k}, t)$. Les parties réelle et imaginaire de $\alpha(\mathbf{k}, t)$ dépendent en effet de deux degrés de liberté indépendants, $\tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t)$ et sa dérivée temporelle ; on vérifie d'ailleurs immédiatement en changeant le signe de \mathbf{k} dans (B-15) et en utilisant (B-18) que :

$$\alpha(-\mathbf{k}, t) = \mathcal{N}(k) \left[\tilde{\mathbf{A}}_\perp^*(\mathbf{k}, t) + \frac{i}{\omega} \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_\perp^*(\mathbf{k}, t) \right] \neq \alpha^*(\mathbf{k}, t) \quad (\text{B-20})$$

Ainsi la connaissance des $\alpha(\mathbf{k}, t)$ dans tout l'espace réciproque n'entraîne pas celle des $\alpha^*(\mathbf{k}, t)$. Il s'ensuit que les intégrales sur \mathbf{k} des variables normales doivent être prises dans tout l'espace, et non se limiter à un demi-espace réciproque.

B-2-d. Expression des grandeurs physiques en termes des variables normales

Nous montrons maintenant que toutes les grandeurs physiques peuvent être exprimées en fonction des variables normales.

α. Champs transverses dans l'espace réciproque

Ré-écrivons l'équation (B-17) en remplaçant \mathbf{k} par $-\mathbf{k}$:

$$\alpha^*(-\mathbf{k}, t) = \mathcal{N}(k) \left[\tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t) - \frac{i}{\omega} \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_\perp(\mathbf{k}, t) \right] \quad (\text{B-21})$$

On peut alors utiliser (B-15) et (B-21) pour exprimer $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ et $\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ en fonction de $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}, t)$ et $\boldsymbol{\alpha}^*(-\mathbf{k}, t)$. On obtient :

$$\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{2\mathcal{N}(k)} [\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}, t) + \boldsymbol{\alpha}^*(-\mathbf{k}, t)] \quad (\text{B-22a})$$

$$\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = -i\frac{\omega}{2\mathcal{N}(k)} [\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}, t) - \boldsymbol{\alpha}^*(-\mathbf{k}, t)] \quad (\text{B-22b})$$

$\beta.$ *Énergie et impulsion du champ transverse*

Reportons les expressions (B-22a) et (B-22b) de $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ et $\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$ dans celle (A-39) de H_{trans} en utilisant des notations plus compactes :

$$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}, t) \quad ; \quad \boldsymbol{\alpha}_{-} = \boldsymbol{\alpha}(-\mathbf{k}, t) \quad (\text{B-23})$$

Il vient :

$$\begin{aligned} H_{\text{trans}} &= \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3k \frac{\omega^2}{4\mathcal{N}^2(k)} [(\boldsymbol{\alpha}^* - \boldsymbol{\alpha}_{-}) \cdot (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_{-}^*) + (\boldsymbol{\alpha}^* + \boldsymbol{\alpha}_{-}) \cdot (\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}_{-}^*)] \\ &= \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3k \frac{\omega^2}{4\mathcal{N}^2(k)} [2\boldsymbol{\alpha}^* \cdot \boldsymbol{\alpha} + 2\boldsymbol{\alpha}_{-} \cdot \boldsymbol{\alpha}_{-}^*] \end{aligned} \quad (\text{B-24})$$

(dans ces équations, nous respectons l'ordre entre $\boldsymbol{\alpha}$ et $\boldsymbol{\alpha}^*$ tel qu'il apparaît dans les calculs, même si $\boldsymbol{\alpha}$ et $\boldsymbol{\alpha}^*$ sont ici des nombres qui commutent ; la raison en est que des calculs très semblables peuvent être faits en théorie quantique, $\boldsymbol{\alpha}$ et $\boldsymbol{\alpha}^*$ étant remplacés par des opérateurs qui ne commutent pas entre eux). Dans l'intégrale des termes en $\boldsymbol{\alpha}_{-} \cdot \boldsymbol{\alpha}_{-}^*$, effectuons le changement de variables $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ pour faire apparaître l'intégrale de $\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\alpha}^*$. Il vient alors :

$$H_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3k \frac{\omega^2}{4\mathcal{N}^2(k)} [\boldsymbol{\alpha}^* \cdot \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\alpha}^*] \quad (\text{B-25})$$

En faisant apparaître explicitement les composantes de $\boldsymbol{\alpha}$ et $\boldsymbol{\alpha}^*$ sur les deux vecteurs polarisation ε perpendiculaires à \mathbf{k} , et en utilisant la notation simplifiée (A-26), on obtient finalement :

$$H_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3k \sum_{\varepsilon} \frac{\omega^2}{4\mathcal{N}^2(k)} [\alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) + \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t)\alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)] \quad (\text{B-26})$$

Cette expression ressemble beaucoup à une somme d'hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques ; un choix approprié de la constante \mathcal{N} sera fait dans le chapitre suivant.

Des calculs analogues peuvent être menés pour l'impulsion $\mathbf{P}_{\text{trans}}$ du champ transverse¹⁰. L'utilisation des équations (A-44), (B-22a) et (B-22b) conduit à :

$$\mathbf{P}_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3k \sum_{\varepsilon} \frac{\omega}{4\mathcal{N}^2(k)} \mathbf{k} [\alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) + \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t)\alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)] \quad (\text{B-27})$$

10. Le développement en variables normales du moment cinétique $\mathbf{J}_{\text{trans}}$ du champ transverse sera calculé dans le Complément B_{XIX}.

γ . *Champs transverses dans l'espace réel*

Considérons tout d'abord le potentiel vecteur transverse $\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$, dont l'expression en fonction des variables normales est donnée par (B-22a). Pour obtenir son expression dans l'espace réel il faut, compte tenu de (A-11), multiplier (B-22a) par $(2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ et intégrer sur \mathbf{k} . Si, de plus, dans l'intégrale contenant $\alpha_{\varepsilon}^*(-\mathbf{k}, t)$, on fait le changement de variables $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, il vient :

$$\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \sum_{\varepsilon} \frac{1}{2\mathcal{N}(k)} [\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \varepsilon e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t) \varepsilon e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (\text{B-28})$$

Des calculs analogues peuvent être menés pour le champ électrique transverse et pour le champ magnétique. Ils conduisent à :

$$\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \sum_{\varepsilon} \frac{i\omega}{2\mathcal{N}(k)} [\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \varepsilon e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t) \varepsilon e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (\text{B-29})$$

et :

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \sum_{\varepsilon} \frac{ik}{2\mathcal{N}(k)} [\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \boldsymbol{\kappa} \times \varepsilon e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t) \boldsymbol{\kappa} \times \varepsilon e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] \quad (\text{B-30})$$

B-3. Modes discrets dans une boîte

Jusqu'ici nous avons considéré que le rayonnement se propage dans l'espace infini, et utilisé des transformées de Fourier continues ; dans la relation (A-11), le champ électrique est décomposé sur une base continue d'ondes planes normées $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}/(2\pi)^{3/2}$. Il est toutefois souvent commode d'utiliser une base discrète en supposant que le rayonnement est contenu dans un boîte de volume fini, qu'on définit généralement comme un cube de côté L ; nous le ferons fréquemment avec le rayonnement quantifié dans les deux chapitres qui suivent. Les composantes de chaque vecteur d'onde sont alors soumises aux conditions aux limites dans la boîte¹¹ qui en rendent les valeurs discrètes :

$$k_{x,y,z} = 2\pi n_{x,y,z}/L \quad (\text{B-31})$$

A la fin du calcul, il est d'ailleurs possible de choisir une valeur de L très grande, et de vérifier que le résultat final ne dépend pas de L .

Au lieu de transformées de Fourier spatiales continues, il faut alors introduire des séries de Fourier discrètes où chaque grandeur physique est décomposée sur des ondes planes normalisées $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}/L^{3/2}$. La décomposition (A-11) du champ électrique devient alors :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}} d^3k \tilde{\mathbf{E}}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{B-32})$$

11. On peut choisir des conditions d'annulation du champ sur les parois, mais il est généralement plus commode de prendre les conditions aux limites périodiques (B-31), qui conduisent à la même densité d'états en k .

avec¹² :

$$\tilde{\mathbf{E}}_{\mathbf{k}}(t) = \frac{1}{L^{3/2}} \int_{\mathcal{V}} d^3r \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{B-33})$$

La somme de (B-32) est discrète, et dans (B-33) l'intégrale est maintenant limitée au volume \mathcal{V} de la boîte.

Pour un champ nul hors de la boîte, il est évidemment possible d'utiliser la transformation de Fourier continue (A-10) pour obtenir la composante du champ $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t)$; elle diffère cependant de la composant discrète $\tilde{\mathbf{E}}_{\mathbf{k}}(t)$, à cause des coefficients introduits dans les définitions. Les deux composantes sont reliées par l'égalité :

$$\tilde{\mathbf{E}}_{\mathbf{k}}(t) = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{3/2} \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{B-34})$$

Les mêmes modifications sont applicables aux transformées de Fourier de toutes les autres grandeurs physiques, le champ magnétique et le potentiel vecteur ainsi que la densité de charge et de courant. Les équations dans l'espace réciproque (A-16), (A-20), (A-24) et suivantes restent valables si l'on remplace les variables continues \mathbf{k} par des variables discrètes, puisqu'il suffit d'en multiplier les deux membres par le facteur $(2\pi)^{3/2} L^{-3/2}$. Pour un champ nul hors de la boîte, les $\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t)$ sont également remplacés par :

$$\alpha_{\mathbf{k},\varepsilon}(t) = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{3/2} \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{B-35})$$

Lorsqu'on revient à l'espace ordinaire (\mathbf{r}, t) par transformée de Fourier inverse, il faut utiliser des relations du type (B-32) au lieu de (A-11). En conséquence, une fois les $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t)$ remplacés par les $\tilde{\mathbf{E}}_{\mathbf{k}}(t)$ dans l'intégrale sur d^3k , il faut également introduire un facteur multiplicatif¹³ :

$$\int d^3k \implies \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{3/2} \sum_{\mathbf{k}} \quad (\text{B-36})$$

B-4. Généralisation de la notion de mode

En l'absence de sources, la solution de l'équation du mouvement (B-16) de la variable normale $\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t)$ est très simple, puisque c'est une exponentielle de fréquence angulaire $\omega = ck$:

$$\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) = \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, 0) e^{-i\omega t} \quad (\text{B-37})$$

En reportant (B-37) dans les expressions obtenues plus haut pour les champs transverses et les autres grandeurs physiques, on constate que les champs sont des superpositions linéaires d'ondes planes progressives $\exp \pm(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ évoluant indépendamment les unes des autres. L'énergie et l'impulsion du champ libre sont des

12. Dans le Complément I, nous utilisons une définition légèrement différente des séries de Fourier, où le facteur $1/L^{3/2}$ est absent de (B-32), et où (B-33) contient un facteur $1/L^3$. La définition que nous utilisons est choisie pour faire directement apparaître un développement de $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ sur des ondes planes normalisées dans le cube.

13. Le produit du facteur multiplicatif de (B-34) par celui de (B-35) redonne bien le facteur $(2\pi/L)^3$ habituel, obtenu directement à partir de (B-31).

sommes de carrés des modules des diverses variables normales, chacun de ces termes étant indépendant du temps et proportionnel à $|\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, 0)|^2$.

Les modes $\{\mathbf{k}, \varepsilon\}$ que nous avons introduits dans ce chapitre permettent de développer les champs transverses libres en ondes planes progressives. Cependant, d'autres développements en ondes monochromatiques autres que des ondes planes progressives sont parfaitement possibles ; ils reposent sur l'existence d'autres familles de modes. Pour le voir, revenons à l'équation (A-30). En l'absence de sources, toute solution monochromatique de cette équation, de la forme $\mathbf{A}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$, obéit nécessairement à l'équation :

$$(\Delta + k^2)\mathbf{A}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{B-38})$$

(qui n'est autre que l'équation de Helmholtz) avec $k = \omega/c$. Cette équation aux valeurs propres admet bien les ondes planes $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ comme base de fonctions propres. Mais ce n'est pas la seule base possible. D'autres bases existent, comme celle des ondes stationnaires $\cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ et $\sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$, celle des ondes multipolaires (modes du rayonnement de moment cinétique donné, alors que les ondes planes ont une impulsion donnée), ou encore les modes gaussiens. De façon générale, toute combinaison linéaire d'ondes planes de même module de \mathbf{k} peut constituer un mode. Quelle que soit la base choisie, l'énergie du champ transverse sera une somme de carrés des modules des variables normales apparaissant dans les développements des champs transverses sur les fonctions propres de cette base. Par contre, l'expression d'autres grandeurs physiques ne garde une forme simple que dans certaines bases. Par exemple, l'impulsion du champ transverse n'est une forme somme de carrés de modules que dans la base des ondes planes progressives, alors que le moment cinétique du champ n'a une forme simple que dans la base des ondes multipolaires.

Notons enfin que le champ peut être contenu dans une cavité avec des conditions aux limites bien définies. La recherche des fonctions propres de l'équation (B-38) satisfaisant à ces conditions aux limites permet de déterminer les modes propres de cette cavité.

En conclusion de ce chapitre, on peut dire que le champ de rayonnement libre est équivalent à un ensemble d'oscillateurs harmoniques à une dimension associés aux modes $\{\mathbf{k}, \varepsilon\}$ repérés par leur vecteur d'onde et leur polarisation transverse. A chacun de ces modes est associée une variable normale du champ, analogue à la variable classique de l'oscillateur classique correspondant qui devient, lors de la quantification, l'opérateur d'annihilation de l'oscillateur. Les résultats établis dans ce chapitre fourniront donc une base simple pour la quantification du rayonnement qui sera abordée dans le chapitre suivant.

A_{XVIII} : FORMULATION LAGRANGIENNE DE L'ÉLECTRODYNAMIQUE

Les équations dynamiques du champ électromagnétique (équations de Maxwell) peuvent être obtenues dans le cadre du formalisme lagrangien, et donc d'un principe de moindre action. Ceci permet d'introduire l'expression des moments conjugués des diverses variables du champ, ainsi que celle de son hamiltonien lorsqu'il est couplé à des particules chargées. Les résultats de ce complément ne sont pas indispensables pour la lecture des autres chapitres et compléments. Ils permettent cependant de donner au lecteur un aperçu d'une autre approche plus générale de l'électrodynamique quantique, approche qui se révèle essentielle pour un traitement relativiste de ces problèmes et pour l'utilisation des intégrales de chemin (Appendice IV).

Complément A_{XVIII}

Formulation lagrangienne de l'électrodynamique

1	Lagrangien avec divers types de variables	408
1-a	Formalisme lagrangien avec des variables discrètes et réelles	408
1-b	Extension à des variables complexes	410
1-c	Lagrangien avec des variables continues	413
2	Application au champ de rayonnement libre	414
2-a	Densités de lagrangien dans l'espace réel et dans l'espace réciproque	414
2-b	Equations de Lagrange	415
2-c	Moment conjugué du potentiel vecteur transverse	416
2-d	Hamiltonien ; équations de Hamilton-Jacobi	417
2-e	Relations de commutation du champ	418
2-f	Opérateurs de création et d'annihilation	419
2-g	Variables d'impulsion discrètes	420
3	Lagrangien du système global champ + particules en interaction	420
3-a	Choix du lagrangien	420
3-b	Equations de Lagrange	421
3-c	Moments conjugués	423
3-d	Hamiltonien	424
3-e	Relations de commutation	424

Introduction

Comme nous le montrons dans l'Appendice III, la dynamique d'un système de points matériels soumis à un potentiel extérieur peut être décrite, soit à partir des équations de Newton, soit à partir d'un lagrangien et d'un principe de moindre action conduisant à des équations de Lagrange équivalentes aux équations de Newton. L'avantage de la formulation lagrangienne est qu'elle est bien adaptée à la quantification de la théorie : elle permet de définir les moments conjugués des coordonnées des particules, l'hamiltonien du système qui est une fonction des coordonnées et des moments conjugués, et d'introduire les relations de commutation canoniques qui sont à la base de la description quantique du système. Le but de ce complément est de montrer de manière succincte comment les équations de Maxwell-Lorentz, étudiées dans ce chapitre et le suivant, peuvent être déduites d'un lagrangien et d'un principe de moindre action. Nous donnerons ainsi une justification plus générale de l'expression de l'hamiltonien du système "champ + particules" postulée dans le Chapitre

XIX et des relations de commutation également postulées dans ce chapitre¹. Un autre avantage de la formulation lagrangienne, que nous n'exploiterons pas ici, est qu'elle se prête bien à une description relativiste du système "champ + particules" ce qui explique pourquoi elle est utilisée dans les théories quantiques des champs relativistes.

Nous commençons dans le § 1 par étendre les calculs de l'Appendice III au cas où les coordonnées du système sont complexes et non réelles, le lagrangien restant toutefois une grandeur réelle. Nous montrons également que le principe de moindre action et les équations de Lagrange peuvent être aisément généralisés au cas d'un champ, c'est-à-dire au cas où les coordonnées du système dépendent d'un indice continu et non discret, comme le point \mathbf{r} dans l'espace réel.

La discussion sera illustrée dans le § 2 sur le lagrangien du champ de rayonnement libre en l'absence de sources. Le champ sera décrit par ses composantes dans l'espace réciproque, qui sont des quantités complexes. Le lagrangien ne dépend alors que des composantes du champ et de leurs dérivées temporelles, ce qui rend les calculs plus simples que si l'on décrivait le champ par ses composantes réelles dans l'espace réel (le lagrangien dans l'espace réel dépend en effet, non seulement des composantes du champ et de leurs dérivées temporelles, mais aussi de leurs dérivées spatiales). Cette étude nous permettra d'établir l'expression de l'hamiltonien du champ, ainsi que les relations de commutation canoniques des composantes de ce champ.

Nous donnons enfin dans le § 3 l'expression du lagrangien de l'électrodynamique en jauge de Coulomb en présence de sources et montrons comment les équations de Lagrange déduites d'un tel lagrangien coïncident avec les équations de Maxwell-Lorentz étudiées dans le Chapitre XVIII. Diverses relations importantes pour la quantification de la théorie seront alors établies : expression des moments conjugués des particules et des champs ; expression de l'hamiltonien du système global champ + particules ; relations de commutation canoniques. Les résultats obtenus dans ce complément permettent ainsi de donner une base plus générale à la procédure de quantification que celle, simplifiée, du Chapitre XIX. Le lecteur intéressé pourra trouver une description plus détaillée de la formulation lagrangienne et hamiltonienne de l'électrodynamique dans le Chapitre II de la référence [15] et dans ses compléments.

1. Lagrangien avec divers types de variables

1-a. Formalisme lagrangien avec des variables discrètes et réelles

Le lagrangien L est une fonction réelle de variables dynamiques constituées de "coordonnées généralisées" $x_i(t)$ repérées par un indice discret i et des "vitesses généralisées" correspondantes $\dot{x}_i(t) = dx_i(t)/dt$. L s'écrit :

$$L [x_1(t), x_2(t), \dots, x_N(t); \dot{x}_1(t), \dot{x}_2(t), \dots, \dot{x}_N(t)] \quad (1)$$

Considérons un mouvement possible du système où les coordonnées $x_i(t)$ suivent un certain "chemin" Γ entre un instant initial t_{in} et un instant final t_{fin} .

1. Les relations ainsi postulées dans le Chapitre XIX sont justifiées a posteriori par le fait qu'elles conduisent aux équations de Heisenberg correctes pour les opérateurs quantiques associés aux particules et aux champs.

L'intégrale de L le long du chemin Γ est, par définition, l'action S_Γ associée à ce chemin :

$$S_\Gamma = \int_{t_{\text{in}}}^{t_{\text{fin}}} L[x_1(t), x_2(t), \dots, x_N(t); \dot{x}_1(t), \dot{x}_2(t), \dots, \dot{x}_N(t)] dt \quad (2)$$

Le *principe de moindre action* consiste à postuler que, parmi tous les chemins possibles partant des mêmes conditions initiales décrites par $x_i(t_{\text{in}})$ et aboutissant aux mêmes conditions finales décrites par $x_i(t_{\text{fin}})$, celui qui est effectivement suivi par le système est celui pour lequel S_Γ est extrémal (lorsque le chemin varie, S_Γ est stationnaire). Considérons alors une variation infinitésimale $\delta x_i(t)$ et $\delta \dot{x}_i(t)$ des variables dynamiques autour de ce chemin d'action extrémale, ne modifiant pas les valeurs initiales et finales des coordonnées, c'est-à-dire telles que :

$$\delta x_i(t_{\text{in}}) = \delta x_i(t_{\text{fin}}) = 0 \quad (3)$$

La variation correspondante de l'action :

$$\delta S = \int_{t_{\text{in}}}^{t_{\text{fin}}} \sum_i \left[\delta x_i(t) \frac{\partial L}{\partial x_i} + \delta \dot{x}_i(t) \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right] dt \quad (4)$$

doit alors être nulle au premier ordre en $\delta x_i(t)$ et $\delta \dot{x}_i(t)$. Remplaçons, dans le dernier terme de (4), $\delta \dot{x}_i(t)$ par :

$$\delta \dot{x}_i(t) = \frac{d}{dt} \delta x_i(t) \quad (5)$$

et intégrons par parties le terme correspondant. Le terme tout intégré est nul à cause de (3). On obtient alors :

$$\delta S = \int_{t_{\text{in}}}^{t_{\text{fin}}} \sum_i \delta x_i(t) \left[\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right] dt \quad (6)$$

Comme δS doit être nul quelles que soient les variations arbitraires $\delta x_i(t)$, le chemin effectivement suivi par le système doit obéir aux N équations :

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = 0 \quad (7)$$

Ces relations sont appelées *équations de Lagrange*; on peut montrer qu'elles sont équivalentes aux équations de Newton (Appendice III).

La prochaine étape du formalisme lagrangien consiste à introduire les *moments conjugués* p_i des coordonnées x_i ; ces moments, aussi appelés *impulsions généralisées*, sont définis par les équations :

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \quad (8)$$

ainsi que l'*hamiltonien* H égal à :

$$H = \sum_i \dot{x}_i p_i - L \quad (9)$$

Prenons la différentielle de H

$$\begin{aligned} dH &= \sum_i \left[p_i d\dot{x}_i + \dot{x}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial x_i} dx_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} d\dot{x}_i \right] \\ &= \sum_i [\dot{x}_i dp_i - \dot{p}_i dx_i] \end{aligned} \quad (10)$$

Pour passer de la première à la deuxième ligne de (10), nous avons utilisé (7) et (8) pour remplacer $\partial L/\partial x_i$ par \dot{p}_i et $\partial L/\partial \dot{x}_i$ par p_i . Supposons que les \dot{x}_i peuvent s'exprimer en fonction des x_i et des p_i . Il apparaît alors que H est une fonction des coordonnées x_i et des moments conjugués p_i dont l'évolution est décrite, compte tenu de (10), par les $2N$ équations :

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \quad (11)$$

appelées *équations de Hamilton-Jacobi*.

Rappelons enfin la procédure de quantification canonique. Elle consiste à associer aux coordonnées x_i et moments conjugués p_i des opérateurs \hat{x}_i et \hat{p}_i satisfaisant aux relations de commutation :

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (12)$$

tous les autres commutateurs étant nuls. Ces résultats ne sont valables que si les coordonnées x_i sont des composantes cartésiennes (voir remarque du § B.5 du Chapitre III).

1-b. Extension à des variables complexes

Supposons maintenant pour simplifier que l'indice i prenne $N = 2$ valeurs. À partir des coordonnées réelles $x_1(t)$ et $x_2(t)$ introduisons les variables complexes :

$$X(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [x_1(t) + ix_2(t)] \quad X^*(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [x_1(t) - ix_2(t)] \quad (13)$$

dont les parties réelle et imaginaire sont, à un facteur $1/\sqrt{2}$ près, égales à $x_1(t)$ et $x_2(t)$ pour $X(t)$, $x_1(t)$ et $-x_2(t)$ pour $X^*(t)$. Les équations (13) peuvent être inversées pour donner :

$$x_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [X(t) + X^*(t)] \quad x_2(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}} [X(t) - X^*(t)] \quad (14)$$

Des équations analogues peuvent être écrites, reliant $\dot{X}(t)$ et $\dot{X}^*(t)$ à $\dot{x}_1(t)$ et $\dot{x}_2(t)$ et réciproquement.

$$\dot{X}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\dot{x}_1(t) + i\dot{x}_2(t)] \quad \dot{X}^*(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\dot{x}_1(t) - i\dot{x}_2(t)] \quad (15)$$

$$\dot{x}_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\dot{X}(t) + \dot{X}^*(t)] \quad \dot{x}_2(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}} [\dot{X}(t) - \dot{X}^*(t)] \quad (16)$$

Si l'on reporte dans le lagrangien (1) les expressions (14) et (16) des variables, on obtient un lagrangien de la forme $L[X(t), X^*(t), \dot{X}(t), \dot{X}^*(t)]$ dépendant de variables

complexes. Notons que, comme (1), ce lagrangien dépendant de variables complexes reste une grandeur réelle puisque son intégrale temporelle le long d'un chemin Γ est une grandeur (action) qui est une quantité réelle. Nous allons étudier ce que deviennent tous les résultats établis plus haut à partir de (1) quand on les exprime en fonction de $X, X^*, \dot{X}, \dot{X}^*$.

α. Equations de Lagrange

Il est important pour la suite de relier $\partial L/\partial X$ et $\partial L/\partial \dot{X}$ à $\partial L/\partial x_1, \partial L/\partial x_2, \partial L/\partial \dot{x}_1$ et $\partial L/\partial \dot{x}_2$. En utilisant (14) et (16), on peut écrire :

$$\frac{\partial L}{\partial X} = \frac{\partial L}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial X} + \frac{\partial L}{\partial x_2} \frac{\partial x_2}{\partial X} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\partial L}{\partial x_1} - i \frac{\partial L}{\partial x_2} \right] \quad (17)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{X}} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} \frac{\partial \dot{x}_1}{\partial \dot{X}} + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_2} \frac{\partial \dot{x}_2}{\partial \dot{X}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} - i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_2} \right] \quad (18)$$

Soustrayons alors de l'équation (17) la dérivée temporelle de l'équation (18). On obtient :

$$\frac{\partial L}{\partial X} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{X}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial L}{\partial x_1} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} \right) - \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial L}{\partial x_2} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_2} \right) \quad (19)$$

Les deux parenthèses du membre de droite de cette équation sont nulles puisque x_1 et x_2 obéissent à l'équation de Lagrange (7). On en déduit que le membre de gauche est lui aussi nul, ainsi que son complexe conjugué² :

$$\frac{\partial L}{\partial X} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{X}} = 0 \qquad \frac{\partial L}{\partial X^*} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^*} = 0 \quad (20)$$

ce qui montre que X et X^* obéissent également à des équations de Lagrange³.

β. Moments conjugués

Dans (18), remplaçons $\partial L/\partial \dot{x}_1$ et $\partial L/\partial \dot{x}_2$ par p_1 et p_2 (voir Eq. (8)). Il vient :

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{X}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 - ip_2) \quad (21)$$

L'équation complexe conjuguée de (21) s'écrit :

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{X}^*} = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 + ip_2) \quad (22)$$

Pour choisir la définition du moment conjugué P de la variable complexe X , il est utile de comparer la manière dont le moment conjugué P et la vitesse \dot{X} se transforment dans le changement de variables dynamiques $x_1, x_2 \rightarrow X, X^*$. Comparons pour cela la première équation (15) et les équations (21) et (22). La vitesse \dot{X} devient $\dot{x}_1 + i\dot{x}_2$; il semble donc judicieux de définir le moment associé P

2. Comme L est réel, on a $(\partial L/\partial X)^* = \partial L/\partial X^*$ et une équation analogue pour $(\partial L/\partial \dot{X})^*$.

3. On aurait pu établir directement ces résultats en reprenant le calcul variationnel conduisant à (6) et en considérant δX et δX^* comme des variations indépendantes.

de manière que P se transforme comme $p_1 + ip_2$. L'examen de (21) et (22) montre alors clairement qu'il faut définir P comme égal, non pas à $\partial L/\partial \dot{X}$, mais à $\partial L/\partial \dot{X}^*$; le complexe conjugué P^* est alors égal à $\partial L/\partial \dot{X}$:

$$P = \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^*} \quad P^* = \frac{\partial L}{\partial \dot{X}} \quad (23)$$

C'est cette définition que nous utiliserons dans toute la suite de ce complément.

γ . *Hamiltonien*

Dans la définition (9) de l'hamiltonien, apparaît la quantité $\dot{x}_1 p_1 + \dot{x}_2 p_2$. Nous pouvons la ré-exprimer en remplaçant \dot{x}_1 et \dot{x}_2 par leurs expressions (16) en fonction de \dot{X} et \dot{X}^* , ainsi que p_1 et p_2 par des expressions analogues en fonction de P et P^* :

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 p_1 + \dot{x}_2 p_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\dot{X} + \dot{X}^*) \frac{1}{\sqrt{2}}(P + P^*) + \frac{-i}{\sqrt{2}}(\dot{X} - \dot{X}^*) \frac{-i}{\sqrt{2}}(P - P^*) \\ &= \dot{X} P^* + \dot{X}^* P \end{aligned} \quad (24)$$

On en déduit :

$$H = \dot{x}_1 p_1 + \dot{x}_2 p_2 - L = \dot{X} P^* + \dot{X}^* P - L \quad (25)$$

Prenons alors la différentielle de H :

$$dH = \dot{X} dP^* + P^* d\dot{X} + \dot{X}^* dP + P d\dot{X}^* - \frac{\partial L}{\partial X} dX - \frac{\partial L}{\partial X^*} dX^* - \frac{\partial L}{\partial \dot{X}} d\dot{X} - \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^*} d\dot{X}^* \quad (26)$$

En utilisant (20) et (23), on obtient :

$$dH = \dot{X}^* dP - \dot{P}^* dX + \dot{X} dP^* - \dot{P} dX^* \quad (27)$$

Si \dot{X} et \dot{X}^* peuvent être ré-exprimés en fonction de X , X^* , P , P^* , H ne dépend que de ces variables et on déduit de (27) les équations de Hamilton-Jacobi :

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\partial H}{\partial P^*} \quad \frac{dP}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial X^*} \quad (28)$$

et les équations complexes conjuguées pour X^* et P^* . On notera que c'est la dérivée partielle par rapport à P^* qui est égale à la dérivée totale de X , et non celle par rapport à P .

δ . *Relations de commutation canoniques*

Lors de la quantification, les diverses variables deviennent des opérateurs \hat{x}_1 , \hat{x}_2 , \hat{p}_1 , \hat{p}_2 , \hat{X} , \hat{P} , \hat{X}^\dagger , \hat{P}^\dagger . Les relations de commutation entre les opérateurs \hat{X} , \hat{P} , \hat{X}^\dagger , \hat{P}^\dagger sont obtenues en exprimant ces opérateurs en fonction de \hat{x}_1 , \hat{x}_2 , \hat{p}_1 , \hat{p}_2 et en utilisant les relations de commutation (12). On vérifie alors aisément que les seuls commutateurs non nuls sont $[\hat{X}, \hat{P}^\dagger]$ et $[\hat{P}, \hat{X}^\dagger] = -[\hat{X}, \hat{P}^\dagger]$. Ainsi, en utilisant (21), (22) et (23), on obtient :

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{P}^\dagger] &= \frac{1}{2} [\hat{x}_1 + i\hat{x}_2, \hat{p}_1 - i\hat{p}_2] \\ &= \frac{1}{2} ([\hat{x}_1, \hat{p}_1] + [\hat{x}_2, \hat{p}_2]) = i\hbar \end{aligned} \quad (29)$$

1-c. Lagrangien avec des variables continues

Nous supposons maintenant que les variables dynamiques du système dépendent d'un indice continu, comme le point \mathbf{r} dans l'espace réel (ou le point \mathbf{k} dans l'espace réciproque dans un espace infini). En d'autres termes, elles forment un champ $\phi_j(\mathbf{r})$, l'indice discret j repérant la composante du champ si ce dernier est vectoriel ; dans l'espace réciproque, ce champ devient $\tilde{\phi}_j(\mathbf{k})$. Nous nous contenterons ici d'établir les équations de Lagrange pour un champ réel. Dans le § 2 qui suit, nous étudierons le champ de rayonnement décrit par ses composantes complexes dans l'espace réciproque. Nous pourrions alors généraliser à un champ complexe tous les résultats établis plus haut pour des variables discrètes et complexes. Nous obtiendrons ainsi l'expression de l'hamiltonien du champ libre et les relations de commutation du champ libre, qui sont essentielles pour la description quantique du champ.

Le lagrangien L d'un champ réel est maintenant l'intégrale dans l'espace réel d'une *densité de lagrangien* \mathcal{L} :

$$L = \int d^3r \mathcal{L}(\mathbf{r}, t) \quad (30)$$

La densité de lagrangien est elle-même une fonction du champ $\phi_j(\mathbf{r})$ et de ses dérivées partielles par rapport à t et aux composantes de \mathbf{r} :

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{L}\left(\phi_j(\mathbf{r}, t), \dot{\phi}_j(\mathbf{r}, t), \partial_i \phi_j(\mathbf{r}, t)\right) \quad (31)$$

avec la notation :

$$\dot{\phi}_j(\mathbf{r}, t) = \partial \phi_j(\mathbf{r}, t) / \partial t \quad (32)$$

$$\partial_i \phi_j(\mathbf{r}, t) = \partial \phi_j(\mathbf{r}, t) / \partial r_i \quad (33)$$

Considérons un chemin possible Γ du champ passant de la valeur $\phi_j(\mathbf{r}, t_{\text{in}})$ à un instant initial t_{in} à une valeur finale $\phi_j(\mathbf{r}, t_{\text{fin}})$ à un instant final t_{fin} . L'action S_Γ associée à ce chemin est, par définition :

$$S_\Gamma = \int_{t_{\text{in}}}^{t_{\text{fin}}} dt \int d^3r \mathcal{L}\left(\phi_j(\mathbf{r}, t), \dot{\phi}_j(\mathbf{r}, t), \partial_i \phi_j(\mathbf{r}, t)\right) \quad (34)$$

Le principe de moindre action exprime que, parmi tous les chemins possibles partant du même état initial et aboutissant au même état final⁴, le (ou les) chemin(s) effectivement suivis par le système sont ceux qui rendent S_Γ extrémal. Calculons la variation δS de l'action pour une variation infinitésimale du chemin caractérisée par les variations infinitésimales $\delta \phi_j(\mathbf{r}, t)$, $\delta(\partial \phi_j(\mathbf{r}, t) / \partial t)$ et $\delta(\partial \phi_j(\mathbf{r}, t) / \partial r_i)$.

$$\delta S = \int_{t_{\text{in}}}^{t_{\text{fin}}} dt \int d^3r \sum_{ij} \left[\delta \phi_j(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_j} + \delta \dot{\phi}_j(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_j} + \delta(\partial_i \phi_j(\mathbf{r}, t)) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \phi_j)} \right] \quad (35)$$

4. On suppose de plus que la densité de lagrangien est nulle, ou tend suffisamment vite vers zéro, quand \mathbf{r} tend vers l'infini.

En utilisant :

$$\begin{aligned}\delta\dot{\phi}_j(\mathbf{r}, t) &= \partial(\delta\phi_j(\mathbf{r}, t))/\partial t \\ \delta(\partial_i\phi_j(\mathbf{r}, t)) &= \partial_i(\delta\phi_j(\mathbf{r}, t))\end{aligned}\quad (36)$$

et en effectuant une intégration par parties des termes proportionnels à $\partial(\delta\phi_j(\mathbf{r}, t))/\partial t$ et $\partial_i(\delta\phi_j(\mathbf{r}, t))$, on trouve que les termes tout intégrés sont nuls par suite des conditions aux limites sur $\delta\phi_j(\mathbf{r}, t)$ aux instants initial et final et pour $\mathbf{r} \rightarrow \infty$. Les termes restants deviennent alors tous proportionnels à $\delta\phi_j(\mathbf{r}, t)$. En les regroupant, on obtient :

$$\delta S = \int_{t_{\text{in}}}^{t_{\text{fin}}} dt \int d^3r \sum_{ij} \delta\phi_j(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_j} - \sum_i \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \phi_j)} \right] \quad (37)$$

Comme δS doit être nul quelles que soient les variations spatiales et temporelles de $\delta\phi_j(\mathbf{r}, t)$, on en déduit que :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_j} - \sum_i \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \phi_j)} = 0 \quad (38)$$

qui sont les équations de Lagrange du champ.

2. Application au champ de rayonnement libre

Nous abordons maintenant l'étude du champ de rayonnement libre (en l'absence de sources) à partir de sa densité de lagrangien dans l'espace réciproque. Nous choisissons la jauge de Coulomb : le potentiel vecteur longitudinal \mathbf{A}_{\parallel} est donc nul et \mathbf{A} se réduit à \mathbf{A}_{\perp} ; de plus, le potentiel scalaire est également nul puisque, en jauge de Coulomb, c'est celui du champ coulombien créé par les charges comme l'indique la relation (A-33) du Chapitre XVIII, et qu'il n'y a pas de charges. Les seuls champs qui interviennent sont donc le champ électrique transverse et le champ magnétique reliés au potentiel vecteur transverse par les équations dans l'espace réel :

$$\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}, t) = -\dot{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{r}, t) \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}, t) \quad (39)$$

et dans l'espace réciproque :

$$\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = -\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) = i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \quad (40)$$

2-a. Densités de lagrangien dans l'espace réel et dans l'espace réciproque

La densité de lagrangien la plus couramment utilisée dans l'espace réel est ⁵ :

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, t) = \frac{\varepsilon_0}{2} [\mathbf{E}_{\perp}^2(\mathbf{r}, t) - c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r}, t)] \quad (41)$$

où c est la vitesse de la lumière. En utilisant (39), on voit que cette densité de lagrangien dépend à la fois de $\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}, t)$, de $\dot{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{r}, t)$ et des dérivées spatiales de $\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}, t)$.

5. Un avantage de cette densité est qu'elle est un invariant relativiste (scalaire de Lorentz).

Passons dans l'espace réciproque. Le lagrangien L s'écrit alors :

$$L = \int d^3k \tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t) \quad (42)$$

où la densité de Lagrangien $\tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t)$ dans l'espace réciproque s'obtient à partir de (41) en ré-exprimant les champs dans l'espace réciproque. Considérons la contribution au lagrangien des deux termes du crochet de (41). En utilisant (40) et l'égalité de Parseval-Plancherel – cf. relation (A-12) du Chapitre XVIII – on peut écrire :

$$\begin{aligned} \int d^3r \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}, t) &= \int d^3k \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_\perp^*(\mathbf{k}, t) \cdot \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_\perp(\mathbf{k}, t) \\ \int d^3r \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \int d^3k \left[(-i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}_\perp^*(\mathbf{k}, t)) \cdot (i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t)) \right] \end{aligned} \quad (43)$$

Les deux vecteurs $\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}_\perp^*(\mathbf{k}, t)$ et $\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t)$ sont situés dans le plan perpendiculaire à \mathbf{k} de sorte que :

$$\int d^3k \left[(-i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}_\perp^*(\mathbf{k}, t)) \cdot (i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t)) \right] = \int d^3k k^2 \tilde{\mathbf{A}}_\perp^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t) \quad (44)$$

Finalement, on obtient l'expression suivante pour la densité de lagrangien dans l'espace réciproque ⁶ :

$$\tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t) = \frac{\varepsilon_0}{2} \left[\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_\perp^*(\mathbf{k}, t) \cdot \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_\perp(\mathbf{k}, t) - c^2 k^2 \tilde{\mathbf{A}}_\perp^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t) \right] \quad (45)$$

Les coordonnées généralisées du champ apparaissent donc comme les composantes du potentiel vecteur transverse et les vitesses généralisées comme les dérivées par rapport au temps de ces coordonnées. A la différence de $\mathcal{L}(\mathbf{r}, t)$, $\tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t)$ ne dépend que de $\tilde{\mathbf{A}}_\perp^*(\mathbf{k}, t)$ et $\dot{\tilde{\mathbf{A}}}_\perp(\mathbf{k}, t)$ et non des dérivées partielles de $\tilde{\mathbf{A}}_\perp^*(\mathbf{k}, t)$ par rapport aux composantes de \mathbf{k} . Les calculs seront donc plus simples dans l'espace réciproque.

Il sera utile pour la suite d'introduire les composantes cartésiennes de $\tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t)$ dans le trièdre formé par $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}/k$ et les deux vecteurs polarisation unitaires $\boldsymbol{\varepsilon}_1(\mathbf{k})$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_2(\mathbf{k})$ dans le plan perpendiculaire à \mathbf{k} . Comme $\tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t)$ est transverse, il n'a pas de composante sur $\boldsymbol{\kappa}$, et on peut écrire :

$$\tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t) = \frac{\varepsilon_0}{2} \sum_\varepsilon \left[\dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t) \dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t) - c^2 k^2 \tilde{A}_{\perp\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t) \tilde{A}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \right] \quad (46)$$

où \sum_ε est une notation simplifiée désignant la sommation sur les deux polarisations transverses $\boldsymbol{\varepsilon}_1(\mathbf{k})$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_2(\mathbf{k})$ – cf. relation (B-13) du Chapitre XVIII.

2-b. Equations de Lagrange

Les équations (38) deviennent ici :

$$\frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t)}{\partial \tilde{A}_{\perp\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t)}{\partial \dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)} = 0 \quad (47)$$

6. Nous utilisons la notation commode $\tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t)$ pour cette densité de lagrangien, mais cette fonction n'est pas la transformée de Fourier de $\mathcal{L}(\mathbf{r}, t)$.

On obtient alors, compte tenu de (46) :

$$\ddot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t) + c^2 k^2 \tilde{A}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t) = 0 \quad (48)$$

équation qui coïncide avec les équations (A-29a) et (A-29b) du Chapitre XVIII donnant l'évolution du potentiel vecteur transverse du champ libre en l'absence de sources (on pose $\tilde{\mathbf{j}}_{\perp} = \mathbf{0}$). Nous retrouvons bien ainsi les prédictions de la formulation habituelle de l'électrodynamique classique des équations de Maxwell.

2-c. Moment conjugué du potentiel vecteur transverse

Pour définir le moment conjugué $\tilde{\Pi}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t)$ de la variable complexe $\tilde{A}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t)$, utilisons l'expression (23). Il faut cependant tenir compte ici du fait que la vitesse $\dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t)$ apparaît plusieurs fois dans l'intégrale sur \mathbf{k} de $\tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t)$. Il faut donc ajouter les contributions correspondantes des dérivées partielles de $\tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t)$ par rapport à ces diverses vitesses dans la définition du moment conjugué $\tilde{\Pi}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t)$. Une telle situation résulte de la réalité des champs dans l'espace réel. Les propriétés de la transformation de Fourier entraînent alors que :

$$A_{\perp}(\mathbf{r}, t) = A_{\perp}^*(\mathbf{r}, t) \quad \Rightarrow \quad \tilde{A}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = \tilde{A}_{\perp}^*(-\mathbf{k}, t) \quad (49)$$

et une relation équivalente pour les dérivées temporelles des composantes du potentiel vecteur transverse. Dans l'intégrale sur \mathbf{k} de $\tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t)$ apparaît donc, en plus du terme $\dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)\dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t)$, le terme $\dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}^*(-\mathbf{k}, t)\dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}(-\mathbf{k}, t)$ qui, d'après (49), est égal à $\dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t)\dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t)^*$ et double donc le premier. Si l'on ignore les termes en $-\mathbf{k}$, il faut donc doubler la contribution des termes en \mathbf{k} , ce qui donne :

$$\begin{aligned} \tilde{\Pi}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t) &= 2 \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t)}{\partial \dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)} \\ &= \varepsilon_0 \dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t) = -\varepsilon_0 \tilde{E}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \end{aligned} \quad (50)$$

Le moment conjugué du potentiel transverse apparaît donc comme étant égal, à un facteur $-\varepsilon_0$ près, au champ électrique transverse.

Une manière équivalente d'obtenir (50) consiste à n'utiliser dans l'expression du lagrangien que des variables indépendantes. La condition de réalité (49) entraîne que, si on connaît les variables dans un demi-espace réciproque, on les connaît dans tout l'espace. On peut donc définir L comme l'intégrale, limitée à un demi-espace réciproque où toutes les variables sont indépendantes, d'une densité de lagrangien notée $\bar{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t)$ égale à deux fois la densité initiale $\tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t)$. En notant f l'intégrale sur un demi-espace (la barre symbolise le fait que l'espace des \mathbf{k} est coupé en deux), on obtient :

$$L = \int d^3k \bar{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t) \quad (51)$$

avec :

$$\bar{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t) = \varepsilon_0 \sum_{\varepsilon} \left[\dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)\dot{\tilde{A}}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t) - \omega^2 \tilde{A}_{\perp\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)\tilde{A}_{\perp\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \right] = 2 \tilde{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t) \quad (52)$$

de sorte que l'on peut aussi définir le moment conjugué du potentiel vecteur transverse par :

$$\tilde{\Pi}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) = \frac{\partial \bar{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t)}{\partial \dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)} = \epsilon_0 \dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) \quad (53)$$

2-d. Hamiltonien ; équations de Hamilton-Jacobi

L'hamiltonien H du champ libre est obtenu en généralisant au cas de variables continues l'expression (25) établie plus haut pour des variables discrètes. Pour ne faire apparaître que des variables indépendantes dans l'intégrale sur \mathbf{k} d'une densité d'hamiltonien $\bar{\mathcal{H}}(\mathbf{k}, t)$, l'intégrale n'est effectuée que sur un demi-espace réciproque :

$$H = \int d^3k \bar{\mathcal{H}}(\mathbf{k}, t) \quad (54)$$

avec une densité d'hamiltonien $\bar{\mathcal{H}}(\mathbf{k}, t)$ égale à :

$$\bar{\mathcal{H}}(\mathbf{k}, t) = -\bar{\mathcal{L}}(\mathbf{k}, t) + \sum_{\epsilon} \left[\dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) \tilde{\Pi}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t) + \dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t) \tilde{\Pi}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) \right] \quad (55)$$

ce qui donne pour H , compte tenu de (53) et (52) :

$$H = \epsilon_0 \int d^3k \sum_{\epsilon} \left[\dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t) \dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) + c^2 k^2 \tilde{A}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t) \tilde{A}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) \right] \quad (56)$$

Si l'on remplace l'intégrale sur un demi-espace de (56) par l'intégrale sur l'espace entier, il faut remplacer ϵ_0 par $\epsilon_0/2$ et on retrouve alors l'expression (B-14) du Chapitre XVIII donnant l'énergie du champ transverse libre. L'hamiltonien obtenu à partir de l'approche lagrangienne coïncide avec l'énergie du champ.

Nous pouvons écrire l'expression (55) de $\bar{\mathcal{H}}(\mathbf{k}, t)$ en fonction des seules variables $\tilde{A}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t)$ et $\tilde{\Pi}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t)$. Il vient, compte tenu de (53) :

$$\bar{\mathcal{H}}(\mathbf{k}, t) = \sum_{\epsilon} \left[\frac{1}{\epsilon_0} \tilde{\Pi}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) \tilde{\Pi}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t) + \epsilon_0 c^2 k^2 \tilde{A}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t) \tilde{A}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) \right] \quad (57)$$

Les équations (28) peuvent être alors généralisées pour donner les équations de Hamilton-Jacobi pour $\tilde{A}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t)$ et $\tilde{\Pi}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t)$:

$$\dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) = \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}(\mathbf{k}, t)}{\partial \tilde{\Pi}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)} = \frac{1}{\epsilon_0} \tilde{\Pi}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) \quad (58a)$$

$$\dot{\tilde{\Pi}}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) = -\frac{\partial \bar{\mathcal{H}}(\mathbf{k}, t)}{\partial \tilde{A}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)} = -\epsilon_0 c^2 k^2 \tilde{A}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) \quad (58b)$$

On vérifie aisément que les deux équations (58a) et (58b) coïncident avec les équations de Maxwell (A-29a) et (A-29b) du Chapitre XVIII décrivant l'évolution des champs transverses en l'absence de sources. L'équation (58a) de ce complément et l'équation (A-29a) du Chapitre XVIII sont identiques et définissent le champ électrique transverse en fonction de la dérivée temporelle du potentiel vecteur transverse. L'équation (58b) de ce complément et l'équation (A-29b) du Chapitre XVIII sont identiques quand $\hat{\mathbf{j}} = \mathbf{0}$. Elles décrivent l'évolution du champ électrique transverse.

2-e. Relations de commutation du champ

La généralisation au cas de variables continues de la relation de commutation canonique (29) donne ici :

$$\left[\hat{A}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}), \hat{\Pi}_{\perp\epsilon'}^{\dagger}(\mathbf{k}') \right] = i\hbar\delta_{\epsilon\epsilon'}\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (59)$$

tous les autres commutateurs étant nuls.

Remarque

Les relations de commutation canoniques ne s'appliquent qu'à des variables conjuguées indépendantes, comme c'est le cas des composantes des divers champs sur les polarisations transverses. Mais les composantes cartésiennes du champ sur un trièdre fixe $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$, $\tilde{A}_{\perp i}(\mathbf{k})$ avec $i = x, y, z$, ne sont pas indépendantes, à cause de la condition de transversalité $\sum_i k_i \tilde{A}_{\perp i}(\mathbf{k}) = 0$. Ainsi :

$$\left[\hat{A}_{\perp i}(\mathbf{k}), \hat{\Pi}_{\perp j}^{\dagger}(\mathbf{k}') \right] \neq i\hbar\delta_{ij}\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (60)$$

Pour obtenir la relation de commutation correcte entre $\hat{A}_{\perp i}(\mathbf{k})$ et $\hat{\Pi}_{\perp j}^{\dagger}(\mathbf{k}')$, il faut ré-exprimer ces quantités en fonction des composantes sur deux vecteurs polarisation ϵ et ϵ' orthogonaux entre eux et orthogonaux tous deux à \mathbf{k} et utiliser (59). Par exemple :

$$\tilde{A}_i(\mathbf{k}) = \epsilon_i \tilde{A}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}) + \epsilon'_i \tilde{A}_{\perp\epsilon'}(\mathbf{k}) \quad (61)$$

où :

$$\epsilon_i = \mathbf{e}_i \cdot \boldsymbol{\epsilon} \quad \epsilon'_i = \mathbf{e}_i \cdot \boldsymbol{\epsilon}' \quad (62)$$

On obtient ainsi :

$$\left[\hat{A}_{\perp i}(\mathbf{k}), \hat{\Pi}_{\perp j}^{\dagger}(\mathbf{k}') \right] = i\hbar(\epsilon_i\epsilon_j + \epsilon'_i\epsilon'_j)\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (63)$$

Cette équation peut être encore transformée si l'on note que ϵ , ϵ' et \mathbf{k}/k forment une base orthonormée, de sorte que :

$$\epsilon_i\epsilon_j + \epsilon'_i\epsilon'_j + k_i k_j / k^2 = \delta_{ij} \quad (64)$$

Finalement, la relation de commutation correcte entre $\hat{A}_{\perp i}(\mathbf{k})$ et $\hat{\Pi}_{\perp j}^{\dagger}(\mathbf{k}')$ s'écrit :

$$\left[\hat{A}_{\perp i}(\mathbf{k}), \hat{\Pi}_{\perp j}^{\dagger}(\mathbf{k}') \right] = i\hbar \left[\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (65)$$

Multiplions les deux membres de (65) par $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}/(2\pi)^3$ et intégrons sur \mathbf{k} et \mathbf{k}' . Apparaît alors au membre de gauche le commutateur des champs dans l'espace réel⁷, $[\hat{A}_{\perp i}(\mathbf{r}), \hat{\Pi}_{\perp j}^{\dagger}(\mathbf{r}')]]$, et au membre de droite la transformée de Fourier de la

7. Pour le terme en $\hat{\Pi}_{\perp j}^{\dagger}(\mathbf{k}')$, on utilise la condition de réalité $\hat{\Pi}_{\perp j}^{\dagger}(\mathbf{k}') = \hat{\Pi}_{\perp j}(-\mathbf{k}')$ et on change \mathbf{k}' en $-\mathbf{k}'$ dans l'intégrale sur \mathbf{k}' .

fonction $(\delta_{ij} - k_i k_j / k^2)$ qui est la *fonction delta transverse*⁸ $\delta_{ij}^\perp(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} & \left[\hat{A}_{\perp i}(\mathbf{r}), \hat{\Pi}_{\perp j}(\mathbf{r}') \right] \\ &= \frac{i\hbar}{(2\pi)^3} \int d^3k \int d^3k' e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \left[\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ &= \frac{i\hbar}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \equiv i\hbar \delta_{ij}^\perp(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (66)$$

2-f. Opérateurs de création et d'annihilation

La variable normale $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}, t)$ introduite dans l'équation (B-15) du Chapitre XVIII évolue en $e^{-i\omega t}$, où $\omega = ck$ quand le champ est libre. D'après le § B-1 du Chapitre XVIII, cette variable devient, lors de la quantification, l'opérateur d'annihilation $\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t)$ de l'oscillateur harmonique associé au mode $\{\mathbf{k}, \varepsilon\}$. La variable normale complexe conjuguée devient quant à elle l'opérateur de création $\hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t)$. L'expression de ces deux opérateurs s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) &= \mathcal{N}(k) \left[\hat{A}_{\perp \varepsilon}(\mathbf{k}, t) + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \hat{\Pi}_{\perp \varepsilon}(\mathbf{k}, t) \right] \\ \hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t) &= \mathcal{N}(k) \left[\hat{A}_{\perp \varepsilon}^\dagger(\mathbf{k}, t) - \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \hat{\Pi}_{\perp \varepsilon}^\dagger(\mathbf{k}, t) \right] \end{aligned} \quad (67)$$

On a utilisé $\hat{A}_{\varepsilon}(\mathbf{k}) = (1/\varepsilon_0) \hat{\Pi}_{\perp \varepsilon}(\mathbf{k})$, compte tenu de (53). La quantité $\mathcal{N}(k)$ est une constante de normalisation, que nous laissons pour l'instant arbitraire. On peut cependant la déterminer en imposant au commutateur des deux opérateurs (67) de généraliser la relation bien connue $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ pour un oscillateur harmonique. Utilisons donc les deux équations (67) pour calculer le commutateur $[\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}), \hat{a}_{\varepsilon'}^\dagger(\mathbf{k}')]^{\dagger}$ en fonction des commutateurs des champs \hat{A}_{\perp} et $\hat{\Pi}_{\perp}^\dagger$ et de leurs adjoints. Comme les seuls commutateurs non nuls sont entre \hat{A}_{\perp} et $\hat{\Pi}_{\perp}^\dagger$ et entre \hat{A}_{\perp}^\dagger et $\hat{\Pi}_{\perp}$, on obtient :

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}), \hat{a}_{\varepsilon'}^\dagger(\mathbf{k}') \right] &= \mathcal{N}^2(k) \frac{-i}{\varepsilon_0 \omega} \left\{ \left[\hat{A}_{\perp \varepsilon}(\mathbf{k}), \hat{\Pi}_{\perp \varepsilon'}^\dagger(\mathbf{k}') \right] - \left[\hat{\Pi}_{\perp \varepsilon}(\mathbf{k}), \hat{A}_{\perp \varepsilon'}^\dagger(\mathbf{k}') \right] \right\} \\ &= \mathcal{N}^2(k) \frac{-i}{\varepsilon_0 \omega} \left\{ 2i\hbar \delta_{\varepsilon \varepsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \right\} \\ &= \mathcal{N}^2(k) \frac{2\hbar}{\varepsilon_0 \omega} \delta_{\varepsilon \varepsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{aligned} \quad (68)$$

Pour passer de la première à la deuxième ligne de (68), nous avons utilisé (59) ainsi que l'équation adjointe. La constante $\mathcal{N}(k)$ est finalement déterminée en imposant que les commutateurs entre les opérateurs d'annihilation et de création soient égaux à $\delta_{\varepsilon \varepsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, ce qui donne :

$$\mathcal{N}(k) = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \omega}{2\hbar}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 ck}{2\hbar}} \quad (69)$$

8. Le lecteur intéressé peut trouver une étude des propriétés de cette fonction dans le Complément A₁ de la référence [15].

Si l'on porte cette relation dans l'égalité (B-25) du Chapitre XVIII, on trouve que la contribution du mode $\{\mathbf{k}, \epsilon\}$ à l'énergie est :

$$\frac{\hbar\omega}{2} [\alpha_{\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)\alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}, t) + \alpha_{\epsilon}(\mathbf{k}, t)\alpha_{\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)] \quad (70)$$

Nous verrons au Chapitre XIX que c'est effectivement l'équivalent de l'expression de l'hamiltonien du rayonnement quantifié.

2-g. Variables d'impulsion discrètes

Au § B-3 du Chapitre XVIII, nous avons examiné le cas où le rayonnement est contenu dans une boîte de volume fini L^3 , et où les sommes sur les impulsions deviennent discrètes. Les relations (59) deviennent :

$$\left[\hat{A}_{\perp\mathbf{k},\epsilon}, \hat{\Pi}_{\perp\mathbf{k}',\epsilon'}^{\dagger} \right] = i\hbar \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \quad (71)$$

Si nous appliquons la substitution (B-34) ou (B-35) de ce chapitre aux deux membres de (67), les deux coefficients $(2\pi/L)^3$ se simplifient, et ces relations restent inchangées (à part que \mathbf{k} est maintenant un indice discret au lieu d'une variable continue).

Quant aux relations (68), elles deviennent :

$$\left[\hat{a}_{\mathbf{k},\epsilon}, \hat{a}_{\mathbf{k}',\epsilon'}^{\dagger} \right] = \mathcal{N}^2(k) \frac{2\hbar}{\epsilon_0\omega} \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \quad (72)$$

3. Lagrangien du système global champ + particules en interaction

Nous étudions maintenant le lagrangien du système total, y compris les interactions entre particules et champ électromagnétique.

3-a. Choix du lagrangien

Nous choisissons un lagrangien de la forme :

$$L = L_R + L_P + L_I \quad (73)$$

où L_R ne dépend que des variables du rayonnement, L_P ne dépend que des variables des particules et L_I dépend des deux types de variables à la fois pour décrire les interactions entre rayonnement et particules.

Pour L_R , nous prendrons le lagrangien que nous avons introduit plus haut pour le champ libre, cf. relations (51) et (52) :

$$L_R = \int d^3k \bar{\mathcal{L}}_R(\mathbf{k}, t) = \epsilon_0 \int d^3k \left[\dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t) \dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) - \omega^2 \tilde{A}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t) \tilde{A}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) \right] \quad (74)$$

Pour le lagrangien L_P des particules repérées par l'indice a , nous prendrons le lagrangien habituel pour un système de particules, à savoir la différence entre leur

énergie cinétique et leur énergie potentielle d'interaction due aux forces de Coulomb qui s'exercent entre elles :

$$L_P = \sum_a \frac{1}{2} m_a (\dot{\mathbf{r}}_a(\mathbf{r}, t))^2 - V_{\text{Coul}} \quad (75)$$

Enfin, le lagrangien d'interaction L_I sera choisi de la forme :

$$L_I = \int d^3r \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}, t) \quad (76)$$

où $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ est la densité de courant des particules donnée par l'expression :

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_a q_a \dot{\mathbf{r}}_a(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)) \quad (77)$$

et q_a la charge de la particule a . Cette expression ne contient pas de terme faisant intervenir A_\parallel , la densité de charge $\rho(\mathbf{r}, t)$ et le potentiel scalaire $U(\mathbf{r}_a, t)$. La raison en est notre choix de la jauge de Coulomb pour laquelle A_\parallel est nul, de sorte que l'énergie du champ électrique longitudinal a été ré-exprimée en fonction des variables des particules ; il en est de même du potentiel scalaire, donnant naissance au terme V_{Coul} qui est inclus dans le lagrangien des particules (75).

Pour la suite des calculs, il sera utile de donner d'autres expressions équivalentes de L_I ; suivant le problème étudié, il sera plus commode d'utiliser l'une ou l'autre de ces expressions. En reportant (77) dans (76), on obtient :

$$L_I = \int d^3r \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}, t) = \sum_a q_a \dot{\mathbf{r}}_a(t) \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}_a, t) \quad (78)$$

Par ailleurs, l'identité de Parseval-Plancherel donne :

$$L_I = \int d^3r \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}, t) = \int d^3k \tilde{\mathbf{j}}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t) \quad (79)$$

Dans l'intégrale sur k de (79) apparaît la somme :

$$\tilde{\mathbf{j}}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t) + \tilde{\mathbf{j}}^*(-\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_\perp(-\mathbf{k}, t) = \tilde{\mathbf{j}}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t) + \tilde{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_\perp^*(\mathbf{k}, t) \quad (80)$$

En limitant l'intégrale à un demi-espace réciproque, on peut donc écrire :

$$\begin{aligned} L_I &= \int d^3k \tilde{\mathbf{j}}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t) \\ &= \int d^3k \left[\tilde{\mathbf{j}}^*(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{k}, t) + \tilde{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t) \cdot \tilde{\mathbf{A}}_\perp^*(\mathbf{k}, t) \right] \end{aligned} \quad (81)$$

3-b. Equations de Lagrange

Nous allons montrer maintenant que les équations de Lagrange associées à (73) coïncident avec les équations de Maxwell-Lorentz, ce qui justifiera le choix fait pour L .

$\alpha.$ *Equations de Lagrange du champ*

La dérivée temporelle du potentiel vecteur transverse $\dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}$ n'apparaît que dans la densité de lagrangien $\tilde{\mathcal{L}}_R(\mathbf{k}, t)$ écrite en (74). En notant $\tilde{\mathcal{L}}$ la densité de lagrangien du système total, on peut donc écrire :

$$\frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial \dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)} = \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}_R}{\partial \dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)} = \varepsilon_0 \dot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) \quad (82)$$

Par ailleurs, $\tilde{A}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t)$ apparaît à la fois dans $\tilde{\mathcal{L}}_R$ et dans $\tilde{\mathcal{L}}_I$ qui est la fonction intégrée dans la dernière intégrale de (81). On a donc :

$$\frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial \tilde{A}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)} = \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}_R}{\partial \tilde{A}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)} + \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}_I}{\partial \tilde{A}_{\perp\epsilon}^*(\mathbf{k}, t)} = -\varepsilon_0 c^2 k^2 \tilde{A}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) + \tilde{j}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) \quad (83)$$

L'équation de Lagrange du champ s'obtient en égalant la dérivée temporelle de (82) à (83), ce qui donne :

$$\ddot{\tilde{A}}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) + c^2 k^2 \tilde{A}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0} \tilde{j}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}, t) \quad (84)$$

Nous retrouvons donc l'équation d'évolution du potentiel vecteur transverse en présence de sources, donnée par l'équation (A-30) du Chapitre XVIII.

$\beta.$ *Equations de Lagrange des particules*

La vitesse $\dot{\mathbf{r}}_a$ de la particule a apparaît dans L_P et L_I . Si on note \dot{x}_a la composante de $\dot{\mathbf{r}}_a$ sur l'axe x , il vient :

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_a} = \frac{\partial L_P}{\partial \dot{x}_a} + \frac{\partial L_I}{\partial \dot{x}_a} = m_a \dot{x}_a + q_a A_{\perp x}(\mathbf{r}_a(t), t) \quad (85)$$

Calculons la dérivée temporelle de cette expression. La dépendance temporelle du second terme de (85) est explicite, via la dépendance en t du potentiel vecteur, implicite via la dépendance en t du point $\mathbf{r}_a(t)$ où ce potentiel est évalué. On a donc :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_a} = m_a \ddot{x}_a + q_a \frac{\partial A_{\perp x}(\mathbf{r}_a, t)}{\partial t} + q_a \dot{\mathbf{r}}_a \cdot \nabla A_{\perp x}(\mathbf{r}_a, t) \quad (86)$$

La dérivée partielle du potentiel vecteur transverse par rapport à t fait apparaître le champ électrique transverse :

$$q_a \frac{\partial A_{\perp x}(\mathbf{r}_a, t)}{\partial t} = -q_a E_{\perp x}(\mathbf{r}_a, t) \quad (87)$$

Quant au dernier terme de (86), il s'écrit :

$$q_a \dot{\mathbf{r}}_a \cdot \nabla A_{\perp x}(\mathbf{r}_a, t) = q_a \left[\dot{x}_a \frac{\partial A_{\perp x}}{\partial x_a} + \dot{y}_a \frac{\partial A_{\perp x}}{\partial y_a} + \dot{z}_a \frac{\partial A_{\perp x}}{\partial z_a} \right] \quad (88)$$

Calculons maintenant la dérivée partielle de L par rapport à la composante x_a de \mathbf{r}_a , qui apparaît dans le terme V_{Coul} de L_P ainsi que dans L_I (via la dépendance en position de \mathbf{A}_{\perp}). On obtient :

$$\frac{\partial L}{\partial x_a} = \frac{\partial L_P}{\partial x_a} + \frac{\partial L_I}{\partial x_a} = -\frac{\partial V_{\text{Coul}}}{\partial x_a} + q_a \dot{\mathbf{r}}_a \cdot \frac{\partial \mathbf{A}_{\perp}}{\partial x_a} \quad (89)$$

Le terme $-\partial V_{\text{Coul}}/\partial x_a$ est la force de Coulomb s'exerçant sur la particule a , c'est-à-dire la force due au champ électrostatique de la distribution de charges agissant sur la charge q_a au point \mathbf{r}_a où se trouve la particule a . On peut encore l'écrire :

$$-q_a \frac{\partial V_{\text{Coul}}}{\partial x} = q_a E_{\parallel x}(\mathbf{r}_a, t) \quad (90)$$

où \mathbf{E}_{\parallel} est le champ électrique longitudinal puisque, comme nous l'avons vu au Chapitre XVIII, le champ électrique longitudinal est égal au champ électrostatique créé par la distribution de charges. Explicitons enfin le dernier terme de (89) :

$$q_a \dot{\mathbf{r}}_a \cdot \frac{\partial \mathbf{A}_{\perp}}{\partial x} = q_a \left[\dot{x}_a \frac{\partial A_x}{\partial x_a} + \dot{y}_a \frac{\partial A_y}{\partial x_a} + \dot{z}_a \frac{\partial A_z}{\partial x_a} \right] \quad (91)$$

L'équation de Lagrange relative à la particule a :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_a} = \frac{\partial L}{\partial x_a} \quad (92)$$

est donc, compte tenu des résultats précédents :

$$m_a \ddot{x}_a = q_a E_x(\mathbf{r}_a, t) + q_a \dot{\mathbf{r}}_a \cdot \nabla A_{\perp x} + q_a \dot{\mathbf{r}}_a \cdot \frac{\partial \mathbf{A}_{\perp}}{\partial x} \quad (93)$$

où le champ électrique total au point \mathbf{r}_a est :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_a) = \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}_a) + \mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r}_a) \quad (94)$$

Regroupons les équations (88) et (91) pour expliciter le dernier terme de (93). Il vient :

$$\begin{aligned} & -q_a \dot{\mathbf{r}}_a \cdot \nabla A_{\perp x} + q_a \dot{\mathbf{r}}_a \cdot \frac{\partial \mathbf{A}_{\perp}}{\partial x_a} \\ &= q_a \left[\dot{y}_a \left(\frac{\partial A_{\perp y}}{\partial x_a} - \frac{\partial A_{\perp x}}{\partial y_a} \right) - \dot{z}_a \left(\frac{\partial A_{\perp x}}{\partial z_a} - \frac{\partial A_{\perp z}}{\partial x_a} \right) \right] \\ &= q_a [\dot{\mathbf{r}}_a \times (\nabla \times \mathbf{A}_{\perp})]_x = q_a (\dot{\mathbf{r}}_a \times \mathbf{B})_x \end{aligned} \quad (95)$$

On retrouve la force de Lorentz magnétique exercée par le champ magnétique sur la particule de vitesse $\dot{\mathbf{r}}_a$. Finalement, l'équation de Lagrange pour la particule a s'écrit :

$$m_a \ddot{\mathbf{r}}_a = q_a \mathbf{E}(\mathbf{r}_a) + q_a \dot{\mathbf{r}}_a \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_a) \quad (96)$$

et coïncide bien avec l'équation de Lorentz (A-3) du Chapitre XVIII. Le lagrangien choisi plus haut redonne donc bien les bonnes équations pour le champ et les particules.

3-c. Moments conjugués

L'équation (82) établie plus haut peut être utilisée pour calculer les moments conjugués $\tilde{\Pi}_{\perp \varepsilon}(\mathbf{k}, t)$ des variables de champ $\tilde{A}_{\perp \varepsilon}(\mathbf{k}, t)$:

$$\tilde{\Pi}_{\perp \varepsilon}(\mathbf{k}, t) = \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial \dot{\tilde{A}}_{\perp \varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)} = \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}_R}{\partial \dot{\tilde{A}}_{\perp \varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)} = \varepsilon_0 \dot{\tilde{A}}_{\perp \varepsilon}(\mathbf{k}, t) = -\varepsilon_0 \tilde{E}_{\perp \varepsilon}(\mathbf{k}, t) \quad (97)$$

De même, le calcul du moment conjugué de la coordonnée \mathbf{r}_a de la particule a est le même que celui conduisant à l'équation (85) :

$$\mathbf{p}_a = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_a} = \frac{\partial L_P}{\partial \dot{\mathbf{r}}_a} + \frac{\partial L_I}{\partial \dot{\mathbf{r}}_a} = m_a \dot{\mathbf{r}}_a + q_a \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}_a) \quad (98)$$

3-d. Hamiltonien

Comme $\hat{A}_{\perp\epsilon}$ et $\hat{\Pi}_{\perp\epsilon}^*$ n'apparaissent que dans le lagrangien \mathcal{L}_R du rayonnement, qui ne dépend que des variables du rayonnement, l'hamiltonien du système global contient un terme H_R identique à celui (56) trouvé pour le champ libre.

Pour obtenir les autres termes provenant des moments conjugués de particules et de la soustraction de L_P et L_I , calculons d'abord $\sum_a \dot{\mathbf{r}}_a \cdot \mathbf{p}_a$. L'équation (98) donne :

$$\sum_a \dot{\mathbf{r}}_a \cdot \mathbf{p}_a = \sum_a [m_a \dot{\mathbf{r}}_a^2 + q_a \dot{\mathbf{r}}_a \cdot \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}_a)] \quad (99)$$

Il faut ensuite soustraire de (99) les valeurs de L_P et L_I données par les équations (75) et (78). Le terme provenant de L_I compense le dernier terme du second membre de (99) et il reste :

$$V_{\text{Coul}} + \sum_a \frac{1}{2} m_a \dot{\mathbf{r}}_a^2 = V_{\text{Coul}} + \sum_a \frac{[\mathbf{p}_a - q_a \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}_a)]^2}{2m_a} \quad (100)$$

Finalement, l'hamiltonien du système global est donné par :

$$H = H_R + V_{\text{Coul}} + \sum_a \frac{[\mathbf{p}_a - q_a \mathbf{A}_\perp(\mathbf{r}_a)]^2}{2m_a} \quad (101)$$

où H_R a la même forme que (56) pour le rayonnement libre. Nous justifions ainsi l'expression de H donnée par l'équation (A-40) du Chapitre XVIII.

3-e. Relations de commutation

Comme les variables du rayonnement et leurs moments conjugués sont les mêmes que pour le champ libre, les relations de commutation pour le champ libre données par l'équation (59) demeurent valables :

$$\left[\hat{A}_{\perp\epsilon}(\mathbf{k}), \hat{\Pi}_{\perp\epsilon'}^\dagger(\mathbf{k}') \right] = i\hbar \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (102)$$

tous les autres commutateurs étant nuls. Quant aux relations de commutation des positions et moments conjugués des particules, ce sont les relations habituelles :

$$[r_{a_i}, p_{b_j}] = i\hbar \delta_{ab} \delta_{ij} \quad (103)$$

où les indices a, b repèrent les particules et les indices $i, j = x, y, z$ les composantes cartésiennes de \mathbf{r} et \mathbf{p} .

Comme au § 2-g, on peut étendre ces relations de commutation au cas où les impulsions sont discrètes.

Chapitre XIX

Quantification du rayonnement électromagnétique

A	Quantification du rayonnement en jauge de Coulomb .	427
A-1	Règles de quantification	427
A-2	Rayonnement contenu dans une boîte	429
A-3	Equations de Heisenberg	430
B	Les photons, excitations élémentaires du champ quantique libre	432
B-1	Espace de Fock du champ quantique libre	433
B-2	Interprétation corpusculaire des états d'énergie et d'impulsion totales déterminées	434
B-3	Quelques exemples d'états quantiques du rayonnement .	435
C	Description des interactions	437
C-1	Hamiltonien d'interaction	437
C-2	Interaction avec un atome. Variables externes et variables internes	438
C-3	Approximation des grandes longueurs d'onde	439
C-4	Hamiltonien dipolaire électrique	440
C-5	Eléments de matrice de l'hamiltonien d'interaction ; règles de sélection	442

Introduction

Le but de ce chapitre est de présenter une description quantique du champ électromagnétique et de ses interactions avec un ensemble de particules chargées. Une telle description est en effet nécessaire pour interpréter certains phénomènes physiques comme l'*émission spontanée* d'un photon par un atome excité, ce que

ne permettent pas les traitements semi-classiques que nous avons utilisés jusqu'ici¹ (champ décrit classiquement, particules quantiquement). Supposons par exemple qu'un champ monochromatique de fréquence angulaire ω soit représenté par un champ classique $E_0 \cos \omega t$; son interaction avec un atome est alors décrite par l'hamiltonien $\widehat{H}_I = -\widehat{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{E}_0 \cos \omega t$, où $\widehat{\mathbf{D}}$ est un opérateur (moment dipolaire électrique) tandis que \mathbf{E}_0 reste une grandeur classique². Un tel traitement est suffisant pour comprendre comment le champ peut exciter l'atome de manière résonnante depuis son niveau fondamental a d'énergie E_a vers un niveau excité b d'énergie E_b , lorsque ω est proche de la pulsation de Bohr atomique $\omega_0 = (E_b - E_a) / \hbar$. Mais supposons maintenant que l'atome se trouve initialement dans l'état excité b , et en l'absence de tout rayonnement incident. Le champ classique \mathbf{E}_0 est alors identiquement nul, ainsi donc que l'hamiltonien d'interaction \widehat{H}_I , de sorte que l'hamiltonien du système total se réduit à l'hamiltonien atomique \widehat{H}_A . Comme cet opérateur est indépendant du temps, ses états propres sont stationnaires, en particulier l'état excité b . La théorie semi-classique prédit ainsi qu'un atome, initialement excité dans un état b en l'absence de rayonnement incident, demeure indéfiniment dans cet état. Or ce n'est pas ce qui est observé expérimentalement : au bout d'un certain temps, l'atome tombe spontanément dans un niveau inférieur a en émettant un photon dont la fréquence est voisine de $\omega_0 = (E_b - E_a) / \hbar$. Ce processus est appelé *émission spontanée*; le temps moyen nécessaire pour qu'il se produise est appelé *durée de vie radiative* de l'état excité b . Ceci fournit un premier exemple de situation où un traitement quantique du rayonnement est indispensable. Mais cet exemple est loin d'être isolé : de nombreuses expériences, de plus en plus élaborées, ont mis en jeu des situations qui nécessitent une description quantique du champ électromagnétique.

L'objet de ce chapitre est donc de présenter les bases de cette description, tout en suivant une approche aussi simple que possible – une présentation plus générale de la quantification du champ de rayonnement électromagnétique est possible en partant de la formulation lagrangienne de l'électrodynamique (Complément A_{XVIII}). Dans le chapitre précédent, nous avons souligné l'analogie qui existe entre les modes propres de vibration du champ de rayonnement et un ensemble d'oscillateurs harmoniques à une dimension. Dans le § A de ce chapitre, nous allons donc utiliser cette analogie pour procéder à une quantification simple de cet ensemble d'oscillateurs : à chaque mode propre i du champ classique, décrit par des variables normales α_i et α_i^* , nous associerons des opérateurs d'annihilation \widehat{a}_i et de création \widehat{a}_i^\dagger qui obéissent aux relations de commutation bien connues $[\widehat{a}_i, \widehat{a}_i^\dagger] = 1$. Nous postulons également une forme plausible pour l'hamiltonien quantique du système "champ + particules", à partir de l'énergie classique de ce système établie dans le chapitre précédent. Nous verrons alors que les équations d'évolution³ des diverses grandeurs dans le point de vue de Heisenberg (Complément G_{III}) ne sont autres que la transposition des équations de Maxwell-Lorentz à des opérateurs décrivant les champs et les particules, convenablement symétrisés. Ceci fournit une justification a posteriori de la procédure simple de quantification utilisée.

Le § B décrit quelques propriétés importantes du champ libre (en l'absence de

1. C'est par exemple ce qui a été fait au Complément A_{XIII} dans l'étude de l'interaction d'un atome avec une onde électromagnétique.

2. Pour plus de clarté, nous utilisons dans tout ce chapitre et ses compléments un symbole "chapeau" pour distinguer l'opérateur \widehat{G} de la grandeur classique correspondante G .

3. De manière plus concise, nous les appellerons équations de Heisenberg.

sources). La structure de l'espace des états de ce champ est celle d'un produit tensoriel d'espaces de Fock, analogues à ceux étudiés dans le Chapitre XV ; les excitations élémentaires du champ ne sont autres que les photons. Quelques états importants du champ seront également décrits : le vide de photons où aucun photon n'est présent, mais où pourtant il existe dans tout l'espace un champ fluctuant autour d'une valeur moyenne nulle ; les états quasi classiques, qui reproduisent les propriétés d'un champ classique donné.

Le § C est consacré à l'étude de l'hamiltonien d'interaction entre champ électromagnétique et particules, en particulier dans le cas où les particules sont des atomes neutres (comme dans l'atome d'hydrogène, où les charges positives et négatives des constituants de l'atome s'équilibrent entre elles). Il est alors possible de distinguer deux types de variables atomiques : les variables du centre de masse (variables externes) et les variables de la "particule relative" dans le système du centre de masse (variables internes). Nous étudierons également l'approximation dipolaire électrique, valable si la longueur d'onde du rayonnement est grande devant les dimensions atomiques, ainsi que les règles de sélection associées à l'hamiltonien d'interaction.

A. Quantification du rayonnement en jauge de Coulomb

A-1. Règles de quantification

Dans le chapitre précédent, nous avons établi l'expression suivante de l'énergie du champ transverse classique :

$$H_{\text{trans}} = \varepsilon_0 \int d^3k \sum_{\varepsilon} \frac{\omega^2}{4\mathcal{N}^2(k)} [\alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) + \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t)\alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)] \quad (\text{A-1})$$

où $\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t)$ et $\alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t)$ sont les variables normales décrivant l'état du champ transverse, et où $\mathcal{N}(k)$ est une constante de normalisation réelle apparaissant dans les équations qui définissent les variables normales en fonction du potentiel vecteur transverse et de sa dérivée temporelle :

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{k}, t) &= \mathcal{N}(k) \left[\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) + \frac{i}{\omega} \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) \right] \\ \alpha^*(\mathbf{k}, t) &= \mathcal{N}(k) \left[\tilde{\mathbf{A}}_{\perp}^*(\mathbf{k}, t) - \frac{i}{\omega} \dot{\tilde{\mathbf{A}}}_{\perp}^*(\mathbf{k}, t) \right] \end{aligned} \quad (\text{A-2})$$

L'analogie entre le champ transverse libre et un ensemble d'oscillateurs harmoniques classiques de fréquence ω associés aux modes $\{\mathbf{k}, \varepsilon\}$ apparaît clairement sur l'expression (A-1).

Pour quantifier le champ, cette analogie suggère de remplacer les variables normales $\alpha(\mathbf{k}, t)$ et $\alpha^*(\mathbf{k}, t)$ par des opérateurs d'annihilation et de création. Nous utiliserons dans ce § A le point de vue de Schrödinger où ces opérateurs sont indépendants du temps, et où la dépendance temporelle est contenue uniquement dans l'évolution du vecteur d'état. La quantification consistera donc à remplacer les $\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t = 0)$ par des opérateurs d'annihilation $a_{\varepsilon}(\mathbf{k})$ indépendant du temps, ainsi bien sûr que les $\alpha_{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, t = 0)$ par les opérateurs de création adjoints $a_{\varepsilon}^{\dagger}(\mathbf{k})$. Lorsque cette opération est effectuée sur (A-1), pour que l'hamiltonien quantique obtenu soit

une somme d'hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques standard, il faut que le facteur $\omega^2/4\mathcal{N}^2(k)$ multipliant le crochet du second membre de (A-1) soit égal à $\hbar\omega/2\epsilon_0$. Nous choisirons donc pour $\mathcal{N}(k)$ la valeur :

$$\mathcal{N}(k) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 ck}{2\hbar}} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \omega}{2\hbar}} \quad (\text{A-3})$$

Nous retrouvons ainsi la relation (69) du Complément A_{XVIII}, obtenue à partir des relations de commutation. Remplaçons alors dans (A-1) les variables normales classiques $\alpha_\epsilon(\mathbf{k}, t)$ et $\alpha_\epsilon^*(\mathbf{k}, t)$ par les opérateurs $\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k})$ et $\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})$ satisfaisant aux relations de commutation :

$$\left[\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}), \hat{a}_{\epsilon'}^\dagger(\mathbf{k}') \right] = \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{A-4a})$$

$$\left[\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}), \hat{a}_{\epsilon'}(\mathbf{k}') \right] = \left[\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k}), \hat{a}_{\epsilon'}^\dagger(\mathbf{k}') \right] = 0 \quad (\text{A-4b})$$

On obtient l'opérateur hamiltonien (cet opérateur sera souvent utilisé, de sorte que nous simplifierons la notation \hat{H}_{trans} en \hat{H}_R) :

$$\hat{H}_R \equiv \hat{H}_{\text{trans}} = \int d^3k \sum_\epsilon \frac{\hbar\omega}{2} \left[\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}) + \hat{a}_\epsilon(\mathbf{k})\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k}) \right] \quad (\text{A-5})$$

qui a la forme attendue pour l'hamiltonien quantique du champ transverse.

Etendant une telle procédure, nous remplaçons ensuite les variables normales classiques par des opérateurs d'annihilation et de création dans toutes les expressions classiques établies dans le chapitre précédent pour les diverses grandeurs physiques. L'impulsion transverse – cf. équation (B-27) du Chapitre XVIII – devient ainsi :

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{trans}} = \int d^3k \sum_\epsilon \frac{\hbar\mathbf{k}}{2} \left[\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}) + \hat{a}_\epsilon(\mathbf{k})\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k}) \right] \quad (\text{A-6})$$

Quant aux champs transverses, écrits en (B-29), (B-30) et (B-28) du Chapitre XVIII, ils deviennent des combinaisons linéaires des opérateurs d'annihilation et de création :

$$\hat{\mathbf{E}}_\perp(\mathbf{r}) = i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sum_\epsilon \left[\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0} \right]^{1/2} \left[\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}) \boldsymbol{\epsilon} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k}) \boldsymbol{\epsilon} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] \quad (\text{A-7})$$

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) = \frac{i}{c} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sum_\epsilon \left[\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0} \right]^{1/2} \left[\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}) \boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k}) \boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\epsilon} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] \quad (\text{A-8})$$

$$\hat{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sum_\epsilon \left[\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega} \right]^{1/2} \left[\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}) \boldsymbol{\epsilon} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k}) \boldsymbol{\epsilon} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] \quad (\text{A-9})$$

Enfin, l'énergie totale du système “particules + champs” donnée par la relation (A-47) du Chapitre XVIII devient :

$$\begin{aligned} \hat{H} = \frac{1}{2m_a} \sum_a \left[\hat{\mathbf{p}}_a - q_a \hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a) \right]^2 + \hat{V}_{\text{Coul}} \\ + \int d^3k \sum_\epsilon \frac{\hbar\omega}{2} \left[\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}_\epsilon(\mathbf{k}) + \hat{a}_\epsilon(\mathbf{k})\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k}) \right] \end{aligned} \quad (\text{A-10})$$

qui a une forme plausible pour être considérée comme l'hamiltonien quantique du système "particules + champs". Les opérateurs positions $\hat{\mathbf{r}}_a$ et impulsions $\hat{\mathbf{p}}_a$ définis à partir de l'équation (A-46) du Chapitre XVIII satisfont aux relations de commutation habituelles :

$$[(\hat{\mathbf{r}}_a)_i, (\hat{\mathbf{p}}_b)_j] = i\hbar \delta_{ab} \delta_{ij} \quad (\text{A-11a})$$

$$[(\hat{\mathbf{r}}_a)_i, (\hat{\mathbf{r}}_b)_j] = [(\hat{\mathbf{p}}_a)_i, (\hat{\mathbf{p}}_b)_j] = 0 \quad (\text{A-11b})$$

Les règles de quantification que nous venons d'introduire de manière heuristique ont l'avantage de la simplicité. Nous allons de plus montrer que les équations de Heisenberg des divers opérateurs décrivant les particules et les champs, déduites de l'hamiltonien (A-10) ainsi que des relations de commutation (A-4), (A-11a) et (A-11b), sont bien les équations de Maxwell-Lorentz entre opérateurs. Un tel résultat conforte a posteriori la procédure de quantification exposée dans ce chapitre.

A-2. Rayonnement contenu dans une boîte

Dans un espace infini, \mathbf{k} est une variable continue, et il existe une infinité continue de modes. Mais, comme nous l'avons mentionné au § B-3 du Chapitre XVIII, il est souvent plus commode de considérer que les champs sont contenus dans un cube de côté L avec des conditions aux limites périodiques ; la variable \mathbf{k} devient alors discrète :

$$k_{x,y,z} = 2\pi n_{x,y,z}/L \quad (\text{A-12})$$

où $n_{x,y,z}$ sont des entiers positifs, négatifs ou nuls. Si L est suffisamment grand, toutes les prédictions physiques doivent être indépendantes de L . Une telle approche conduit à remplacer les intégrales de Fourier par des séries de Fourier et les intégrales sur \mathbf{k} par des sommes discrètes. Pour un champ classique, les variables continues $\alpha_\varepsilon(\mathbf{k}, t)$ deviennent alors des variables discrètes $\alpha_{\mathbf{k},\varepsilon}(t)$; si le champ est nul hors de la boîte, la relation (B-35) du chapitre XVIII indique le coefficient de multiplication qui s'introduit alors entre les deux types de variables.

Pour quantifier le système, on procède alors comme précédemment. En point de vue de Schrödinger, chaque coefficient classique $\alpha_{\mathbf{k},\varepsilon}(t=0)$ d'une série de Fourier devient un opérateur d'annihilation $\hat{a}_{\mathbf{k}\varepsilon}$; chaque coefficient $\alpha_{\mathbf{k},\varepsilon}^*(t=0)$ devient un opérateur de création $\hat{a}_{\mathbf{k}\varepsilon}^\dagger$. Ce dernier crée un quantum dans un mode du champ confiné à l'intérieur de la boîte (au lieu de s'étendre dans tout l'espace). Les relations de commutation (A-4) deviennent alors :

$$[\hat{a}_{\mathbf{k},\varepsilon}, \hat{a}_{\mathbf{k}',\varepsilon'}^\dagger] = \delta_{\varepsilon\varepsilon'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \quad (\text{A-13a})$$

$$[\hat{a}_{\mathbf{k},\varepsilon}, \hat{a}_{\mathbf{k}',\varepsilon'}] = [\hat{a}_{\mathbf{k},\varepsilon}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}',\varepsilon'}^\dagger] = 0 \quad (\text{A-13b})$$

La relation (B-36) du Chapitre XVIII indique que, une fois que les variables discrètes ont été insérées dans les expressions des champs, il faut appliquer la règle suivante de correspondance entre sommes continues et discrètes :

$$\int d^3k \implies \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{3/2} \sum_{\mathbf{k}} \quad (\text{A-14})$$

Les expressions (A-7) à (A-9) sont alors modifiées. Par exemple, la relation (A-7) devient :

$$\hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{r}) = i \sum_{\mathbf{k}, \varepsilon} \left[\frac{\hbar \omega}{2\varepsilon_0 L^3} \right]^{1/2} \left[\hat{a}_{\mathbf{k}, \varepsilon} \varepsilon e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}, \varepsilon}^{\dagger} \varepsilon e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right] \quad (\text{A-15})$$

En plus du remplacement de l'intégrale par une somme discrète, accompagné d'une multiplication par un facteur $(2\pi)^{3/2}$, il faut donc ne pas oublier de diviser le développement du champ par la racine carrée du volume L^3 . Les deux relations (A-8) et (A-9) subissent les mêmes modifications.

A-3. Equations de Heisenberg

A-3-a. Equations de Heisenberg des particules matérielles

Commençons par l'équation d'évolution de $\hat{\mathbf{r}}_a(t)$:

$$\dot{\hat{\mathbf{r}}}_a(t) = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{\mathbf{r}}_a(t), \hat{H} \right] \quad (\text{A-16})$$

Le seul terme de l'hamiltonien (A-10) qui ne commute pas avec $\hat{\mathbf{r}}_a$ est le premier terme. En utilisant la relation de commutation qui découle de (A-11a) et (A-11b) :

$$[(\hat{\mathbf{r}}_a)_i, f((\hat{\mathbf{p}}_a)_j)] = \delta_{ij} \frac{\partial f}{\partial (\hat{\mathbf{p}}_a)_i} \quad (\text{A-17})$$

nous obtenons :

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\mathbf{r}}}_a(t) &= \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{\mathbf{r}}_a(t), \frac{1}{2m_a} \left(\hat{\mathbf{p}}_a(t) - q_a \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_a, t) \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{m_a} \left[\hat{\mathbf{p}}_a(t) - q_a \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_a, t) \right] \end{aligned} \quad (\text{A-18})$$

Cette égalité n'est autre que la transposition opératorielle :

$$\hat{\mathbf{p}}_a(t) = m_a \dot{\hat{\mathbf{r}}}_a(t) + q_a \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_a, t) \quad (\text{A-19})$$

de l'équation classique reliant impulsion \mathbf{p}_a et quantité de mouvement $m_a \dot{\mathbf{r}}_a$.

Considérons maintenant l'équation de Heisenberg donnant l'évolution de la vitesse $\hat{\mathbf{v}}_a$ de la particule a . Elle fournit l'équation de la dynamique de cette particule :

$$m_a \dot{\hat{\mathbf{v}}}_a(t) = m_a \ddot{\hat{\mathbf{r}}}_a(t) = \frac{m_a}{i\hbar} \left[\hat{\mathbf{v}}_a(t), \hat{H} \right] \quad (\text{A-20})$$

Nous effectuons ci-dessous le calcul du commutateur $[\hat{\mathbf{v}}_a(t), \hat{H}]$; il conduit à l'équation quantique du mouvement de la particule a :

$$m_a \ddot{\hat{\mathbf{r}}}_a = q_a \hat{\mathbf{E}}(\hat{\mathbf{r}}_a) + \frac{q_a}{2} \left[\hat{\mathbf{v}}_a \times \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) - \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) \times \hat{\mathbf{v}}_a \right] \quad (\text{A-21})$$

qui n'est autre que l'équation de Lorentz quantique décrivant le mouvement des particules sous l'effet de l'interaction avec le champ magnétique $\hat{\mathbf{B}}$ et avec le champ électrique total $\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{E}}_{\parallel} + \hat{\mathbf{E}}_{\perp}$. La force magnétique $q_a \left[\hat{\mathbf{v}}_a \times \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) - \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) \times \hat{\mathbf{v}}_a \right] / 2$

prend une forme particulière qui résulte, comme le montre le calcul ci-dessous, du calcul des équations de Heisenberg ; cette forme provient du fait que l'opérateur $\hat{\mathbf{v}}_a \times \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a)$ n'est pas hermitique. Pour le rendre hermitique, il faut lui ajouter son adjoint $(\hat{\mathbf{v}}_a \times \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a))^\dagger$, qui n'est autre que $-\hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) \times \hat{\mathbf{v}}_a$, et diviser le tout par 2.

Démonstration de l'équation (A-21)

Pour calculer le commutateur de $m_a \hat{\mathbf{v}}_a / i\hbar$ avec le premier terme de \hat{H} , il est commode de calculer au préalable les commutateurs suivants :

$$\begin{aligned} m_a^2 [(\hat{\mathbf{v}}_a)_j, (\hat{\mathbf{v}}_a)_l] &= -q_a \left[(\hat{\mathbf{p}}_a)_j, (\hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a))_l \right] - q_a \left[(\hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a))_j, (\hat{\mathbf{p}}_a)_l \right] \\ &= i\hbar q_a \left[\partial_j (\hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a))_l - \partial_l (\hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a))_j \right] \\ &= i\hbar q_a \sum_k \varepsilon_{jlk} (\hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a))_k, \end{aligned} \quad (\text{A-22})$$

où ε_{jkl} est le tenseur complètement antisymétrique permettant d'écrire les composantes du produit vectoriel de deux vecteurs \mathbf{a} et \mathbf{b} sous la forme $(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_k = \sum_{jl} \varepsilon_{kjl} a_j b_l$. On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{m_a}{i\hbar} \left[(\hat{\mathbf{v}}_a)_j, \sum_l m_a (\hat{\mathbf{v}}_a)_l^2 / 2 \right] \\ = \frac{m_a^2}{2i\hbar} \sum_l \{ (\hat{\mathbf{v}}_a)_l [(\hat{\mathbf{v}}_a)_j, (\hat{\mathbf{v}}_a)_l] + [(\hat{\mathbf{v}}_a)_j, (\hat{\mathbf{v}}_a)_l] (\hat{\mathbf{v}}_a)_l \} \end{aligned} \quad (\text{A-23})$$

$$= \frac{q_a}{2} \sum_k \sum_l \varepsilon_{jlk} \{ (\hat{\mathbf{v}}_a)_l (\hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a))_k + (\hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a))_k (\hat{\mathbf{v}}_a)_l \} \quad (\text{A-24})$$

La dernière ligne de (A-24) peut être écrite sous la forme :

$$\frac{q_a}{2} \left[\hat{\mathbf{v}}_a \times \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) - \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) \times \hat{\mathbf{v}}_a \right]_j \quad (\text{A-25})$$

et apparaît comme la composante sur l'axe j de la force magnétique symétrisée. Le commutateur de $m_a \hat{\mathbf{v}}_a / i\hbar$ avec le second terme de \hat{H} s'écrit :

$$\frac{m_a}{i\hbar} [(\hat{\mathbf{v}}_a)_j, V_{\text{Coul}}] = \frac{1}{i\hbar} [(\hat{\mathbf{p}}_a)_j, V_{\text{Coul}}] = -\frac{\partial}{\partial (\hat{\mathbf{r}}_a)_j} V_{\text{Coul}} = q_a (\hat{\mathbf{E}}_\parallel(\hat{\mathbf{r}}_a))_j \quad (\text{A-26})$$

Il décrit l'interaction de la particule a avec le champ électrique longitudinal.

Reste enfin à calculer le commutateur de $m_a \hat{\mathbf{v}}_a / i\hbar$ avec le dernier terme de \hat{H} . En utilisant les relations de commutation (A-4) et les expressions (A-9) et (A-7) de $\hat{\mathbf{A}}_\perp$ et $\hat{\mathbf{E}}_\perp$, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{m_a}{i\hbar} \left[(\hat{\mathbf{v}}_a)_j, \int d^3k \sum_\varepsilon \hbar\omega \left(\hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) + 1/2 \right) \right] \\ = iq_a \int d^3k \sum_\varepsilon \omega \left[(\hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a))_j, \hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) \right] \\ = q_a (\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a))_j \end{aligned} \quad (\text{A-27})$$

Ce terme décrit l'interaction de la particule a avec le champ électrique transverse. Finalement, le regroupement de (A-25), (A-26) et (A-27) conduit à (A-21).

A-3-b. Equations de Heisenberg des champs

Comme tous les champs sont des combinaisons linéaires des opérateurs $\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t)$ et $\hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t)$, il suffit de considérer l'équation de Heisenberg pour $\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t)$:

$$\dot{\hat{a}}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t), \hat{H} \right] \quad (\text{A-28})$$

Le commutateur avec le premier terme de \hat{H} donne :

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t), \sum_a \frac{m_a \hat{\mathbf{v}}_a^2}{2} \right] &= \sum_a \frac{m_a}{2i\hbar} \left\{ \hat{\mathbf{v}}_a \cdot \frac{\partial \hat{\mathbf{v}}_a}{\partial \hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t)} + \frac{\partial \hat{\mathbf{v}}_a}{\partial \hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t)} \cdot \hat{\mathbf{v}}_a \right\} \\ &= \sum_a \frac{i q_a}{2\hbar} \mathcal{A}(k) \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \left[\hat{\mathbf{v}}_a e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}}_a} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}}_a} \hat{\mathbf{v}}_a \right] \end{aligned} \quad (\text{A-29})$$

Si l'on introduit l'opérateur courant (symétrisé pour le rendre hermitique) :

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_a q_a \left[\hat{\mathbf{v}}_a \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a) + \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a) \hat{\mathbf{v}}_a \right] \quad (\text{A-30})$$

l'équation (A-29) peut être ré-écrite sous la forme :

$$\begin{aligned} \sum_a \frac{i q_a}{2\hbar} \mathcal{A}(k) \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \left[\hat{\mathbf{v}}_a e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}}_a} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}}_a} \hat{\mathbf{v}}_a \right] &= \frac{i}{\sqrt{2\varepsilon_0 \hbar \omega} (2\pi)^3} \int d^3 r e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{i}{\sqrt{2\varepsilon_0 \hbar \omega}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \tilde{\hat{\mathbf{j}}}(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (\text{A-31})$$

Le commutateur avec le second terme de \hat{H} est nul, alors que le commutateur avec le troisième donne, compte tenu de (A-4) :

$$\frac{1}{i\hbar} \left[\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t), \int d^3 k \sum_\varepsilon \hbar \omega \left(\hat{a}_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) + 1/2 \right) \right] = -i\omega \hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-32})$$

Finalement, le regroupement de (A-31) et (A-32) donne :

$$\dot{\hat{a}}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) + i\omega \hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t) = \frac{i}{\sqrt{2\varepsilon_0 \hbar \omega}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \tilde{\hat{\mathbf{j}}}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{A-33})$$

qui est, pour l'opérateur $\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k}, t)$, une équation d'évolution de même forme que l'équation d'évolution des variables normales classiques $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}, t)$, donnée par l'équation (B-19) du Chapitre XVIII. Comme cette dernière est équivalente aux équations de Maxwell pour les champs transverses, la conclusion est que les équations de Heisenberg des champs transverses quantiques ne sont autres que des équations de Maxwell habituelles appliquées aux opérateurs champ.

B. Les photons, excitations élémentaires du champ quantique libre

Nous étudions maintenant un certain nombre de propriétés du champ électromagnétique ainsi quantifié, en commençant par le cas plus simple : celui du champ en l'absence de particules chargées.

B-1. Espace de Fock du champ quantique libre

L'espace des états du système total champ + particules est le produit tensoriel de l'espace des états des particules \mathcal{E}_P par celui du champ de rayonnement \mathcal{E}_R . Ce dernier est lui-même le produit tensoriel des espaces des états des oscillateurs harmoniques associés aux divers modes $\{\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}\}$:

$$\mathcal{E}_R = \mathcal{E}_{\mathbf{k}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_1} \otimes \mathcal{E}_{\mathbf{k}_2, \boldsymbol{\varepsilon}_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{E}_{\mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i} \otimes \dots \quad (\text{B-1})$$

où $\mathcal{E}_{\mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i}$ est l'espace des états de l'oscillateur associé au mode $\{\mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i\}$, de fréquence ω_i .

Nous supposons que le rayonnement est contenu dans un cube de côté L , comme nous l'avons déjà fait au § A-2. Les opérateurs $\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k})$ dépendant des variables continues \mathbf{k} se transforment alors en des opérateurs $\hat{a}_{\mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i}$ dépendant uniquement de variables discrètes. On peut même utiliser des notations \hat{a}_i plus concises, où l'indice i désigne⁴ l'ensemble des indices $\mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i$; les opérateurs $\hat{a}_\varepsilon(\mathbf{k})$ deviennent alors les \hat{a}_i . Comme nous supposons dans cette partie les interactions nulles, il sera commode d'utiliser le point de vue de Heisenberg. La dépendance temporelle des \hat{a}_i et \hat{a}_i^\dagger est particulièrement simple, puisque :

$$\hat{a}_i(t) = \exp(i\hat{H}_R t/\hbar) \hat{a}_i \exp(-i\hat{H}_R t/\hbar) = \hat{a}_i e^{-i\omega_i t} \quad (\text{B-2})$$

ainsi que la relation adjointe.

Une fois les variables discrètes insérées dans les expressions continues des champs, il faut utiliser la règle (A-14) pour transformer les intégrales continues en sommes discrètes. Les développements de ces champs en variables normales sont alors :

$$\hat{\mathbf{E}}_\perp(\mathbf{r}, t) = i \sum_i \left(\frac{\hbar\omega_i}{2\epsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \left[\hat{a}_i \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} - \hat{a}_i^\dagger \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} \right] \quad (\text{B-3})$$

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t) = i \sum_i \left(\frac{\hbar\mathbf{k}_i}{2\epsilon_0 L^3} \right)^{1/2} \left[\hat{a}_i \boldsymbol{\kappa}_i \times \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} - \hat{a}_i^\dagger \boldsymbol{\kappa}_i \times \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} \right] \quad (\text{B-4})$$

$$\hat{\mathbf{A}}_\perp(\mathbf{r}, t) = \sum_i \left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_i L^3} \right)^{1/2} \left[\hat{a}_i \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} + \hat{a}_i^\dagger \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} \right] \quad (\text{B-5})$$

$$\hat{H}_R = \sum_i \frac{\hbar\omega_i}{2} \left[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \right] = \sum_i \hbar\omega_i \left[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right] \quad (\text{B-6})$$

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{trans}} = \sum_i \frac{\hbar\mathbf{k}_i}{2} \left[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \right] = \sum_i \hbar\mathbf{k}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (\text{B-7})$$

On remarque que le dernier terme de (B-7) ne contient pas de $1/2$, du fait que $\sum_i \mathbf{k}_i = \mathbf{0}$.

4. Pour chaque \mathbf{k}_i , il existe deux vecteurs polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}_{i1}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_{i2}$ perpendiculaires à \mathbf{k}_i et perpendiculaires entre eux. La notation compacte \sum_i doit donc être comprise comme une sommation sur \mathbf{k}_i et, pour chaque valeur de \mathbf{k}_i , sur $\boldsymbol{\varepsilon}_{i1}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_{i2}$.

B-2. Interprétation corpusculaire des états d'énergie et d'impulsion totales déterminées

Considérons tout d'abord le mode i . Les valeurs propres de l'opérateur $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ qui apparaît dans les expressions (B-6) et (B-7) de \hat{H}_R et \hat{P}_{trans} sont tous les entiers n_i positifs ou nuls :

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle, \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{B-8})$$

Rappelons l'action bien connue des opérateurs \hat{a}_i^\dagger et \hat{a}_i sur les états $|n_i\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger |n_i\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle \\ \hat{a}_i |n_i\rangle &= \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle \\ \hat{a}_i |0_i\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B-9})$$

Comme $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ commute avec $\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$, les états propres de \hat{H}_R et \hat{P}_{trans} sont les produits tensoriels des états propres $|n_1 \dots n_i \dots\rangle = |n_1\rangle \otimes \dots \otimes |n_i\rangle \dots$ des opérateurs $\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \dots$:

$$\hat{H}_R |n_1 \dots n_i \dots\rangle = \sum_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle \quad (\text{B-10a})$$

$$\hat{P}_{\text{trans}} |n_1 \dots n_i \dots\rangle = \sum_i n_i \hbar \mathbf{k}_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle \quad (\text{B-10b})$$

L'état fondamental du champ correspond à tous les n_i nuls et sera noté $|0\rangle$:

$$|0\rangle = |0_1 \dots 0_i \dots\rangle \quad (\text{B-11})$$

les états $|n_1 \dots n_i \dots\rangle$ étant obtenus par action d'un certain nombre d'opérateurs de création sur cet état $|0\rangle$:

$$|n_1 \dots n_i \dots\rangle = \frac{(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \dots \frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} \dots |0\rangle \quad (\text{B-12})$$

Par rapport à l'état fondamental du champ, l'état $|n_1 \dots n_i \dots\rangle$ a une énergie $\sum_i n_i \hbar \omega_i$ et une impulsion $\sum_i n_i \hbar \mathbf{k}_i$. Il peut être interprété comme décrivant un ensemble de n_1 particules d'énergie $\hbar \omega_1$ et d'impulsion $\hbar \mathbf{k}_1$, ..., de n_i particules d'énergie $\hbar \omega_i$ et d'impulsion $\hbar \mathbf{k}_i$, ... Ces particules caractérisent les excitations élémentaires du champ quantique et sont appelées *photons*. Le nombre quantique n_i représente donc le nombre de photons occupant le mode i , de sorte que l'état fondamental $|0\rangle$, qui correspond à tous les n_i nuls, peut être appelé le *vide* de photons.

S'il existe pour des photons des états propres de l'impulsion et de l'énergie, il n'existe pas d'état quantique du champ électromagnétique dont la position serait parfaitement déterminée; aucun opérateur de position n'est associé à ce champ. La situation est donc différente de celle que l'on rencontre avec des particules massives, qui ont à la fois un opérateur de position et un autre d'impulsion; les fonctions d'onde dans les deux représentations sont reliées par une simple transformation de Fourier. Cette absence d'opérateur position est reliée à l'impossibilité, en superposant linéairement des ondes électromagnétiques qui sont transversales, de construire une onde vectorielle qui serait parfaitement localisée en un point de l'espace. Le caractère relativiste et transversal du champ électromagnétique se traduit par des relations de commutation de ses composantes qui font intervenir une fonction delta transverse (Complément A_{XVIII}, § 2-e) au lieu d'une fonction delta ordinaire.

B-3. Quelques exemples d'états quantiques du rayonnement

Étudions maintenant quelques exemples d'états dans lesquels peut se trouver le rayonnement quantique.

B-3-a. Vide de photons

La présence du terme $1/2$ dans la parenthèse du second membre de (B-10a) entraîne que l'énergie de l'état vide n'est pas nulle, mais égale à $\sum_i \hbar\omega_i/2$; or cette somme est une quantité infinie. Nous trouvons ici un premier exemple des difficultés liées aux divergences qui apparaissent en électrodynamique quantique. Elles peuvent être résolues par les techniques de *renormalisation*, dont l'exposé sort du cadre de cet ouvrage. Nous contournerons cette difficulté en ne prenant en compte que les différences d'énergie par rapport au vide.

Si l'on considère un seul mode i du champ, l'énergie $\hbar\omega_i/2$ de l'état vide de ce mode est finie et rappelle l'énergie de point zéro d'un oscillateur harmonique de fréquence ω_i . Rappelons que cette énergie de point zéro est due à l'impossibilité d'annuler simultanément la position x et l'impulsion p de l'oscillateur en raison des relations de Heisenberg. L'état d'énergie la plus basse de l'oscillateur résulte donc d'un compromis entre énergie cinétique, proportionnelle à p^2 , et énergie potentielle, proportionnelle à x^2 (problème discuté dans le § D-2 du Chapitre V). Les mêmes arguments peuvent être développés pour la contribution du mode i au champ électrique $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{r}, t)$ et au champ magnétique $\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t)$ en un point donné \mathbf{r} ; d'après (B-3) et (B-4), ce sont deux superpositions linéaires différentes des opérateurs \hat{a}_i et \hat{a}_i^{\dagger} , qui donc ne commutent pas. Il est donc impossible d'annuler simultanément l'énergie électrique, proportionnelle à $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}^2$, et l'énergie magnétique, proportionnelle à $\hat{\mathbf{B}}^2$.

On peut d'ailleurs calculer la valeur moyenne et la variance de la contribution du mode i au champ électrique $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{r}, t)$ en un point \mathbf{r} . Comme \hat{a}_i et \hat{a}_i^{\dagger} changent n_i de ± 1 , un calcul simple donne :

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{r}, t) | 0 \rangle_{\text{mode } i} = 0 \quad (\text{B-13a})$$

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{E}}_{\perp}^2(\mathbf{r}, t) | 0 \rangle_{\text{mode } i} = \frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3} \quad (\text{B-13b})$$

Des calculs analogues s'appliquent pour le champ magnétique. Ils montrent que, dans l'état vide de photons, la valeur moyenne des champs électrique et magnétique est nulle mais que la variance ne l'est pas. Comme le résultat (B-13b) est proportionnel à \hbar , le fait que la variance des champs dans le vide n'est pas nulle est un effet quantique.

Remarques

(i) La somme sur tous les modes des expressions (B-13) donne, après remplacement de la somme discrète par une intégrale :

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{r}, t) | 0 \rangle = 0 \quad (\text{B-14a})$$

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{E}}_{\perp}^2(\mathbf{r}, t) | 0 \rangle = \sum_i \frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3} = \frac{\hbar c}{2\varepsilon_0 \pi^2} \int_0^{k_M} k^3 dk \quad (\text{B-14b})$$

La variance du champ électrique diverge donc comme la quatrième puissance de la borne supérieure de l'intégrale sur k qui apparaît dans la somme sur les modes de fréquence $\omega = ck$. C'est la même divergence que celle signalée plus haut.

(ii) On peut aussi calculer les fonctions de corrélation des champs dans le vide ⁵, qui caractérisent la dynamique des fluctuations de ces champs. On trouve que les champs électrique et magnétique fluctuent très rapidement autour de leur valeur moyenne nulle. Ces fluctuations sont appelées *fluctuations du vide*. Certaines corrections radiatives, comme le déplacement de Lamb ou “Lamb shift” dans les atomes, peuvent être interprétées physiquement comme résultant de la vibration de l’électron atomique sous l’effet de l’interaction avec ce champ électrique fluctuant. Cette vibration entraîne en effet que l’électron explore le potentiel coulombien du noyau sur l’étendue de son mouvement de vibration. La correction à son énergie de liaison que ceci introduit n’est pas la même suivant le niveau d’énergie dans lequel il se trouve, et on peut comprendre ainsi pourquoi la dégénérescence entre les états $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ de l’atome d’hydrogène, prévue par l’équation de Dirac, peut être levée par l’interaction avec les fluctuations du vide ⁶.

B-3-b. Etats quasi classiques du champ

L’état et les observables d’un champ classique sont caractérisés par les variables normales $\{\alpha_i\}$ introduites dans le § B. Les états cohérents d’un oscillateur harmonique à une dimension, étudiés dans le Complément G_V, peuvent être utilisés pour construire les états du champ quantique qui reproduisent au mieux les propriétés du champ classique $\{\alpha_i\}$

L’état cohérent $|\alpha\rangle$, supposé normé, d’un oscillateur harmonique à une dimension est l’état propre de l’opérateur d’annihilation \hat{a} , de valeur propre α :

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{B-15}$$

La valeur propre α peut être complexe car l’opérateur \hat{a} n’est pas hermitique. L’équation (B-15) entraîne que :

$$\langle\alpha|\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha \quad \langle\alpha|\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \alpha^* \tag{B-16}$$

Plus généralement, la valeur moyenne de toute fonction de \hat{a} et \hat{a}^\dagger , une fois rangée dans l’ordre *normal*, c’est-à-dire avec tous les opérateurs d’annihilation rangés à droite des opérateurs de création (Complément B_{XVI}, § 1-a- α), est égale à l’expression obtenue en remplaçant l’opérateur \hat{a} par α et l’opérateur \hat{a}^\dagger par α^* . Par exemple :

$$\langle\alpha|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha^*\alpha \tag{B-17}$$

Considérons alors l’état du champ quantique :

$$|\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_i\rangle \dots = |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_i, \dots\rangle \tag{B-18}$$

pour lequel chaque mode i est dans l’état cohérent $|\alpha_i\rangle$ correspondant à la variable normale classique α_i . En utilisant les équations (B-16) et (B-17), on peut obtenir les valeurs moyennes des divers opérateurs champs (B-3), (B-4) et (B-5) dans l’état (B-18) ; on constate alors qu’elles coïncident avec les valeurs de ces diverses grandeurs physiques pour un champ classique décrit par les variables normales $\{\alpha_i\}$. Il en est

5. Voir par exemple le paragraphe III.C.3.c de la référence [15] ainsi que son Complément C_{III}.

6. Voir par exemple [16].

de même des observables énergie et impulsion du champ transverse (B-6) et (B-7). C'est pourquoi l'état quantique (B-18), qui reproduit en valeur moyenne toutes ces propriétés d'un champ classique, est appelé *état quasi classique*⁷. Nous verrons également plus loin que les fonctions de corrélation des champs quantique et classique intervenant dans les divers signaux de photodétection coïncident lorsque l'état du champ est un état quasi classique.

B-3-c. Etats à un photon

Considérons le vecteur d'état :

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |1_i\rangle \otimes \prod_{j \neq i} |0_j\rangle \quad (\text{B-19})$$

superposition linéaire de kets où un mode i contient un photon alors que tous les autres modes $j \neq i$ sont vides. Un tel ket est un ket propre de l'opérateur nombre total de photons $\hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ avec la valeur propre 1. C'est donc bien un état à un photon. En revanche, sauf cas particulier, ce n'est pas un état stationnaire car il n'est pas état propre de l'énergie \hat{H}_R du champ. Il décrit un photon unique se propageant dans l'espace à la vitesse c . Nous verrons effectivement plus loin (Complément D_{XX}) qu'un photodétecteur placé dans une petite région de l'espace enregistre, lorsque le champ est dans l'état (B-19), un signal traduisant le passage dans cette région d'un paquet d'ondes.

C. Description des interactions

C-1. Hamiltonien d'interaction

L'hamiltonien \hat{H} du système "particules + champ" a été donné plus haut. Dans l'expression (A-10) de cet hamiltonien, séparons les termes qui ne dépendent que des variables des particules, ceux qui ne dépendent que des variables du rayonnement, et enfin ceux qui dépendent à la fois des deux types de variables. Nous pouvons alors écrire $\hat{H} = \hat{H}_P + \hat{H}_R + \hat{H}_I$, où l'hamiltonien des particules est :

$$\hat{H}_P = \sum_a \frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m_a} + \hat{V}_{\text{Coul}} \quad (\text{C-1})$$

alors que celui du rayonnement est :

$$\hat{H}_R = \sum_i \hbar \omega_i \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{C-2})$$

Enfin, l'hamiltonien d'interaction est la somme :

$$\hat{H}_I = \hat{H}_{I1} + \hat{H}_{I2}, \quad (\text{C-3})$$

avec :

$$\hat{H}_{I1} = - \sum_a \frac{q_a}{2m_a} \left[\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a) + \hat{\mathbf{A}}_\perp(\hat{\mathbf{r}}_a) \cdot \hat{\mathbf{p}}_a \right] \quad (\text{C-4})$$

7. Pour une discussion plus détaillée des propriétés des états quasi classiques du rayonnement, voir le § III.C.4 de la référence [15].

$$\hat{H}_{I2} = \sum_a \frac{q_a^2}{2m_a} \left[\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_a) \right]^2 \quad (\text{C-5})$$

(nous avons séparé les termes linéaires et quadratiques vis-à-vis des champs).

De plus, il faut également ajouter à l'hamiltonien d'interaction le terme :

$$\hat{H}_{I1}^s = - \sum_a \hat{\mathbf{M}}_a^s \cdot \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{r}}_a) \quad (\text{C-6})$$

décrivant l'interaction, avec le champ magnétique du rayonnement, du moment magnétique de spin des diverses particules :

$$\hat{\mathbf{M}}_a^s = g_a \frac{q_a}{2m_a} \hat{\mathbf{S}}_a \quad (\text{C-7})$$

où g_a est le "facteur de Landé" de la particule a dont le spin est noté $\hat{\mathbf{S}}_a$.

Remarque

Même avec ce terme supplémentaire, toutes les interactions possibles ne sont pas contenues dans l'hamiltonien : il faudrait lui ajouter le couplage spin-orbite des électrons, l'interaction hyperfine entre l'électron et le noyau, etc. – cf. Remarque (iii) du § C-5. Cependant, l'hamiltonien que nous avons écrit est suffisant dans un grand nombre de cas.

C-2. Interaction avec un atome. Variables externes et variables internes

Considérons maintenant le cas où le système de particules est constitué d'un atome que nous supposons ici neutre, formé d'un électron e dont les opérateurs position et impulsion sont respectivement $\hat{\mathbf{r}}_e$ et $\hat{\mathbf{p}}_e$ et d'un noyau N dont les opérateurs position et impulsion sont respectivement $\hat{\mathbf{r}}_N$ et $\hat{\mathbf{p}}_N$; les charges des deux particules sont opposées ($q_e = -q_N = q$) et leurs masses sont notées m_e et m_N . C'est le cas par exemple de l'atome d'hydrogène. Il est bien connu (voir par exemple le § B du Chapitre VII) qu'on peut séparer les variables $\hat{\mathbf{R}}$ et $\hat{\mathbf{P}}$ du centre de masse du système et les variables $\hat{\mathbf{r}}$ et $\hat{\mathbf{p}}$ de la particule relative. Ces deux types de variables commutent entre elles et sont données par les équations :

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{R}} = \frac{m_e \hat{\mathbf{r}}_e + m_N \hat{\mathbf{r}}_N}{M} \\ \hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}_e - \hat{\mathbf{r}}_N \end{cases} \quad \begin{cases} \hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_e + \hat{\mathbf{p}}_N \\ \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_e}{m_e} - \frac{\hat{\mathbf{p}}_N}{m_N} \end{cases} \quad (\text{C-8})$$

où nous avons noté la masse totale du système M et sa masse réduite m :

$$M = m_e + m_N \quad ; \quad m = \frac{m_e m_N}{M} \quad (\text{C-9})$$

Exprimé en fonction de ces nouvelles variables, l'hamiltonien de particules s'écrit :

$$\hat{H}_P = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}_{\text{Coul}}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{C-10})$$

Les variables du centre de masse, appelées encore *variables externes*, décrivent le mouvement global de l'atome, alors que les variables de la particule relative, appelées encore *variables internes*, décrivent le mouvement dans le référentiel du centre de masse.

C-3. Approximation des grandes longueurs d'onde

Dans les hamiltoniens d'interaction (C-4), (C-5) et (C-6) apparaissent les champs évalués aux positions \mathbf{r}_e et \mathbf{r}_N de l'électron et du noyau. On peut repérer la position de l'électron et du noyau par rapport à celle du centre de masse et écrire par exemple :

$$\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_e) = \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{r}}_e - \hat{\mathbf{R}}) \quad (\text{C-11})$$

Dans un atome, la distance entre la position de l'électron ou du noyau et celle du centre de masse de l'atome est de l'ordre de la dimension de l'atome, c'est-à-dire une fraction de nanomètre. Or, les longueurs d'onde des rayonnements susceptibles d'interagir de manière résonnante avec l'atome sont de l'ordre d'une fraction de micron, beaucoup plus grandes que la dimension atomique. On peut donc négliger la variation des champs sur des distances de l'ordre de $|\mathbf{r}_e - \mathbf{R}|$ (ou $|\mathbf{r}_N - \mathbf{R}|$) et écrire :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_e) &\simeq \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}}) \\ \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_N) &\simeq \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}}) \end{aligned} \quad (\text{C-12})$$

Une telle approximation est appelée approximation des grandes longueurs d'onde (ou approximation dipolaire).

Si l'on effectue cette approximation dans l'hamiltonien d'interaction \hat{H}_{I1} , il vient :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{I1} &= -\frac{q_e}{m_e} \hat{\mathbf{p}}_e \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_e) - \frac{q_N}{m_N} \hat{\mathbf{p}}_N \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{r}}_N) \\ &\simeq -q \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_e}{m_e} - \frac{\hat{\mathbf{p}}_N}{m_N} \right] \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}}) \\ &= -\frac{q}{m} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}}) \end{aligned} \quad (\text{C-13})$$

On a utilisé $q_e = -q_N = q$ ainsi que la définition (C-8) de l'impulsion de la particule relative.

Quant à l'hamiltonien \hat{H}_{I2} , il devient dans cette approximation :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{I2} &= \frac{q_e^2}{2m_e} \hat{\mathbf{A}}_{\perp}^2(\hat{\mathbf{r}}_e) + \frac{q_N^2}{2m_N} \hat{\mathbf{A}}_{\perp}^2(\hat{\mathbf{r}}_N) \\ &\simeq \frac{q^2}{2m} \hat{\mathbf{A}}_{\perp}^2(\hat{\mathbf{R}}) \end{aligned} \quad (\text{C-14})$$

Remarque

Pour l'hamiltonien de couplage magnétique de spin \hat{H}_{I1}^s écrit en (C-6), on y remplace également tous les $\hat{\mathbf{r}}_a$ par $\hat{\mathbf{R}}$. Mais ce n'est pas suffisant : il faut ajouter d'autres termes de même ordre, obtenus en incluant les termes du premier ordre en $\mathbf{k} \cdot (\hat{\mathbf{r}}_e - \hat{\mathbf{R}})$ dans \hat{H}_{I1} et \hat{H}_{I2} , et représentant des corrections à l'approximation des grandes longueurs d'onde. En effet, un calcul analogue à celui du § 1.d du Complément A_{XIII} montre que ces corrections font apparaître des nouveaux termes d'interaction du même ordre que \hat{H}_{I1}^s : interaction entre le moment orbital \mathbf{L} de l'atome et le champ magnétique du rayonnement ; interaction quadrupolaire électrique.

C-4. Hamiltonien dipolaire électrique

Dans le cadre de l'approximation des grandes longueurs d'onde, l'hamiltonien global du système atome + champ s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2m} \left[\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}}) \right]^2 + \hat{V}_{\text{Coul}} + \sum_i \frac{\hbar\omega_i}{2} \left[\hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_i + \hat{a}_i\hat{a}_i^{\dagger} \right] \quad (\text{C-15})$$

Nous allons effectuer sur cet hamiltonien une transformation unitaire qui conduit à un nouvel hamiltonien d'interaction ne comportant qu'un seul terme, de la forme $-\hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}})$, où $\hat{\mathbf{D}}$ est l'opérateur moment dipolaire électrique de l'atome :

$$\hat{\mathbf{D}} = q \hat{\mathbf{r}} \quad (\text{C-16})$$

et $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}})$ le champ quantique donné par l'expression (B-3). Ce nouvel hamiltonien d'interaction est appelé *hamiltonien dipolaire électrique*.

Pour trouver la forme de cette transformation unitaire, il est commode de commencer par le cas plus simple où le champ de rayonnement est traité classiquement.

C-4-a. Hamiltonien dipolaire électrique pour un champ classique

Si le champ de rayonnement est traité classiquement, comme un champ extérieur dont la dynamique est imposée de l'extérieur et dont la dépendance temporelle est donc fixée, le dernier terme de (C-15) n'existe pas ; l'opérateur $\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}})$, qui figure dans le second terme doit être remplacé par le champ extérieur $\mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t)$. L'hamiltonien du système s'écrit alors :

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2m} \left[\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t) \right]^2 + \hat{V}_{\text{Coul}} \quad (\text{C-17})$$

Nous cherchons une transformation unitaire qui effectue une translation de $\hat{\mathbf{p}}$ d'une quantité $q\mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t)$, de sorte que le second terme de (C-17) se réduise à $\hat{\mathbf{p}}^2/2m$. Une telle transformation s'écrit :

$$\hat{T}(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} q \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t) \right] \quad (\text{C-18})$$

En effet, on vérifie en utilisant $[\hat{\mathbf{p}}, f(\hat{\mathbf{r}})] = -i\hbar \partial f / \partial \hat{\mathbf{r}}$ et le fait que la variable interne $\hat{\mathbf{r}}$ commute avec la variable externe $\hat{\mathbf{R}}$, que :

$$\hat{T}(t) \hat{\mathbf{p}} \hat{T}^{\dagger}(t) = \hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t) \quad (\text{C-19})$$

Les autres termes de (C-17), qui ne dépendent pas de $\hat{\mathbf{p}}$, demeurent inchangés dans la transformation. En revanche, comme cette transformation dépend explicitement du temps via le terme $q\mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t)$, le nouvel hamiltonien H' , qui régit l'évolution du nouveau vecteur d'état :

$$|\Psi'(t)\rangle = \hat{T}(t)|\Psi(t)\rangle \quad (\text{C-20})$$

est donné par :

$$\hat{H}'(t) = \hat{T}(t)\hat{H}(t)\hat{T}^{\dagger}(t) + i\hbar \left[\frac{d\hat{T}(t)}{dt} \right] \hat{T}^{\dagger}(t) \quad (\text{C-21})$$

Comme de plus :

$$i\hbar \left[\frac{d\hat{T}(t)}{dt} \right] \hat{T}^\dagger(t) = q\hat{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t)}{\partial t} = -\hat{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{E}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t) \quad (\text{C-22})$$

où $\hat{\mathbf{D}}$ est le moment dipolaire électrique de l'atome défini en (C-16), on obtient finalement :

$$\hat{H}'(t) = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + V_{\text{Coul}} - \hat{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{E}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}, t) \quad (\text{C-23})$$

dont le dernier terme a bien la forme attendue pour un hamiltonien dipolaire électrique.

C-4-b. Hamiltonien dipolaire électrique pour un champ quantique

Les résultats précédents suggèrent de considérer la transformation unitaire :

$$\hat{T} = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} q \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\perp e}(\hat{\mathbf{R}}) \right] \quad (\text{C-24})$$

où c'est maintenant l'opérateur $\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}})$ qui figure dans l'exponentielle. On peut vérifier que cet opérateur est toujours un opérateur de translation pour $\hat{\mathbf{p}}$, de sorte que le second terme de (C-15) se simplifie en $\hat{\mathbf{p}}^2/2m$.

Comme la transformation (C-24) ne dépend plus explicitement du temps, nous n'avons plus de terme analogue à (C-22). En revanche, il faut étudier la transformation du dernier terme de (C-15) qui représente l'énergie \hat{H}_R du champ transverse quantique. Pour cela, il est commode de ré-écrire l'expression (C-24) en utilisant le développement (B-5) de $\hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}})$ en \hat{a}_i et \hat{a}_i^\dagger :

$$\hat{T} = \exp \left[\sum_i \left(\lambda_i^* \hat{a}_i - \lambda_i \hat{a}_i^\dagger \right) \right] \quad (\text{C-25})$$

avec :

$$\lambda_i = \frac{i}{\sqrt{2\epsilon_0 \hbar \omega_i} L^3} \boldsymbol{\epsilon}_i \cdot \hat{\mathbf{D}} e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}}} \quad (\text{C-26})$$

Sous cette forme, l'opérateur \hat{T} apparaît comme un opérateur de translation, car il satisfait aux équations :

$$\hat{T} \hat{a}_j \hat{T}^\dagger = \hat{a}_j + \lambda_j \quad \hat{T} \hat{a}_j^\dagger \hat{T}^\dagger = \hat{a}_j^\dagger + \lambda_j^* \quad (\text{C-27})$$

Pour démontrer (C-27), on peut utiliser (Complément B_{II}, § 5 d) l'identité :

$$e^{(A+B)} = e^A e^B e^{-[A,B]/2} \quad (\text{C-28})$$

valable si A et B commutent avec leur commutateur $[A, B]$, ainsi que la relation de commutation $[\hat{a}, f(\hat{a}^\dagger)] = \partial f / \partial \hat{a}^\dagger$. La transformation du dernier terme de (C-15) donne donc :

$$\hat{T} \hat{H}_R \hat{T}^\dagger = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \left[(\hat{a}_i + \lambda_i)(\hat{a}_i^\dagger + \lambda_i^*) + (\hat{a}_i^\dagger + \lambda_i^*)(\hat{a}_i + \lambda_i) \right] \quad (\text{C-29})$$

Les termes du second membre de (C-29) indépendants de λ_i et λ_i^* redonnent \hat{H}_R . Les termes linéaires en λ_i et λ_i^* donnent :

$$\begin{aligned} \sum_i \hbar\omega_i \left(\lambda_i \hat{a}_i^\dagger + \lambda_i^* \hat{a}_i \right) &= - \sum_i i \sqrt{\frac{\hbar\omega_i}{2\epsilon_0 L^3}} \left(\hat{a}_i \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}}} - \hat{a}_i^\dagger \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}}} \right) \cdot \hat{\mathbf{D}} \\ &= -\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}}) \cdot \hat{\mathbf{D}} \end{aligned} \quad (\text{C-30})$$

où l'on a utilisé (B-3). On retrouve ainsi la forme dipolaire électrique de l'hamiltonien d'interaction :

$$\hat{H}_I = -\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}}) \cdot \hat{\mathbf{D}} \quad (\text{C-31})$$

Enfin, les termes quadratiques en λ_i et λ_i^* introduisent un terme que nous noterons \hat{h}_{dip} :

$$\hat{h}_{\text{dip}} = \sum_i \hbar\omega_i \lambda_i^* \lambda_i = \sum_i \frac{1}{2\epsilon_0 L^3} \left(\boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \hat{\mathbf{D}} \right)^2 \quad (\text{C-32})$$

qui représentent une énergie dipolaire propre de l'atome.

Finalement, le regroupement de tous les termes précédents donne pour l'hamiltonien transformé :

$$\hat{H}' = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + V_{\text{Coul}} + \hat{H}_R - \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}}) + \hat{h}_{\text{dip}} \quad (\text{C-33})$$

Nous retrouvons donc bien une forme semblable à (C-23), avec en plus un terme \hat{h}_{dip} .

Remarques :

- (i) Un même opérateur mathématique ne décrit pas la même grandeur physique dans deux représentations qui se déduisent l'une de l'autre par une transformation unitaire. En particulier, l'opérateur $\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}})$ apparaissant dans (C-31) ne représente plus le champ électrique transverse dans le nouveau point de vue, qui serait le transformé par \hat{T} de $\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}})$; ce serait donc $\hat{T}\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}})\hat{T}^\dagger$, qui diffère de $\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}})$. En fait, on peut montrer que l'opérateur $\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}})$ représente dans le nouveau point de vue la grandeur physique $\hat{\mathcal{D}}(\hat{\mathbf{R}})/\epsilon_0$ où $\hat{\mathcal{D}}(\hat{\mathbf{R}})$ est l'induction électrique (voir Complément A_{IV} de [15]).
- (ii) L'expression de l'énergie propre dipolaire \hat{h}_{dip} est donnée par une intégrale en k , qui est divergente à l'infini. Il faut toutefois limiter cette intégrale aux valeurs de k pour lesquelles l'approximation des grandes longueurs d'onde est valable.

C-5. Éléments de matrice de l'hamiltonien d'interaction ; règles de sélection

Considérons un état initial où l'atome est dans l'état interne $|\psi_{\text{in}}^{\text{int}}\rangle$, dans l'état externe $|\psi_{\text{in}}^{\text{ext}}\rangle$, et où le rayonnement est dans l'état $|\psi_{\text{in}}^R\rangle$. L'hamiltonien d'interaction (C-31) couple cet état initial à un état final où les variables atomiques internes, externes et les variables de rayonnement sont dans les états $|\psi_{\text{fin}}^{\text{int}}\rangle$, $|\psi_{\text{fin}}^{\text{ext}}\rangle$, et $|\psi_{\text{fin}}^R\rangle$, respectivement. Comme l'opérateur $\hat{\mathbf{E}}_\perp(\hat{\mathbf{R}})$ qui figure dans (C-31) est une superposition linéaire d'opérateurs d'annihilation \hat{a}_i et de création \hat{a}_i^\dagger , l'élément de matrice de \hat{H}_I décrit deux types de processus : les processus d'absorption associés à l'opérateur \hat{a}_i au cours desquels un photon disparaît et les processus d'émission associés à

l'opérateur \hat{a}_i^\dagger au cours desquels un photon nouveau apparaît. Cet élément de matrice se factorise en un produit de trois éléments de matrice relatifs aux trois types de variables qui s'écrivent, pour les processus d'absorption :

$$i\sqrt{\frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0L^3}} \langle \psi_{\text{fin}}^{\text{int}} | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \hat{\mathbf{D}} | \psi_{\text{in}}^{\text{int}} \rangle \langle \psi_{\text{fin}}^{\text{ext}} | \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}}) | \psi_{\text{in}}^{\text{ext}} \rangle \langle \psi_{\text{fin}}^R | \hat{a}_i | \psi_{\text{in}}^R \rangle \quad (\text{C-34})$$

et pour les processus d'émission :

$$-i\sqrt{\frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0L^3}} \langle \psi_{\text{fin}}^{\text{int}} | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \hat{\mathbf{D}} | \psi_{\text{in}}^{\text{int}} \rangle \langle \psi_{\text{fin}}^{\text{ext}} | \exp(-i\mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}}) | \psi_{\text{in}}^{\text{ext}} \rangle \langle \psi_{\text{fin}}^R | \hat{a}_i^\dagger | \psi_{\text{in}}^R \rangle \quad (\text{C-35})$$

Le terme central de ces expressions est un élément de matrice faisant intervenir les variables atomiques externes; il exprime la conservation de l'impulsion globale. En effet, l'opérateur $\exp(\pm i\mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}})$ est un opérateur de translation de l'impulsion, d'une quantité $\pm\hbar\mathbf{k}_i$. Si le centre de masse de l'atome a une impulsion initiale $\hbar\mathbf{K}_{\text{in}}$, après l'absorption du photon \mathbf{k}_i son impulsion finale sera égale à $\hbar\mathbf{K}_{\text{fin}} = \hbar\mathbf{K}_{\text{in}} + \hbar\mathbf{k}_i$; l'impulsion $\hbar\mathbf{k}_i$ du photon absorbé est donc gagnée par l'atome lors de ce processus d'absorption. On montre de même que l'impulsion de l'atome diminue d'une quantité $\hbar\mathbf{k}_i$ lors de l'émission d'un photon.

Dans le premier élément de matrice de (C-34), qui fait intervenir les variables atomiques internes, l'opérateur $\hat{\mathbf{D}}$ est un opérateur impair. L'élément de matrice n'est donc différent de zéro que si les états atomiques internes initial et final ont des parités opposées, ce qui est par exemple le cas des états $1s$ et $2p$ de l'atome d'hydrogène. Nous retrouvons ici une deuxième loi de conservation, la conservation de la parité. De plus, l'opérateur $\hat{\mathbf{D}}$ est un opérateur vectoriel, ce qui entraîne des règles de sélection sur le moment cinétique interne, qui seront étudiées dans le Complément C_{XIX}.

Remarques

- (i) La conservation de l'impulsion globale apparaît sur l'élément de matrice central des expressions (C-34) et (C-35). On peut se demander si ce résultat n'est valable que pour la forme approchée (C-31) de l'hamiltonien d'interaction utilisée pour établir ces équations. En fait on peut montrer, à partir des relations de commutation $[\mathbf{p}_a, F(\mathbf{r}_a)] = -i\hbar\partial F/\partial\mathbf{r}_a$ et $[\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i, \hat{a}_i] = -\hat{a}_i$, que l'hamiltonien d'interaction \hat{H}_{I1} écrit en (C-4) (sans approximation des grandes longueurs d'onde) commute avec l'impulsion totale du système $\sum_a \hat{\mathbf{p}}_a + \sum_i \hbar\mathbf{k}_i\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i$. Le même résultat est valable pour tous les autres termes de l'hamiltonien d'interaction. Ceci entraîne que l'hamiltonien d'interaction exact n'a d'éléments de matrice non nuls qu'entre états de même impulsion totale. La relation de commutation de l'impulsion totale avec tous les termes de l'hamiltonien traduit l'invariance du système total par translation spatiale. Les propriétés de ce système ne changent pas si l'on translate de la même quantité les particules et les champs. Des considérations analogues s'appliquent à l'invariance par rotation et entraînent que l'hamiltonien d'interaction ne peut relier que des états de même moment cinétique total. Ces résultats sont importants pour comprendre simplement les échanges d'impulsion et de moment cinétique entre atomes et photons, qui sont discutés dans les Compléments A_{XIX} et C_{XIX}.
- (ii) La conservation de l'impulsion totale lors du processus d'absorption, combinée à la conservation de l'énergie totale, permet de montrer que l'énergie du photon absorbé diffère de l'énergie séparant les deux niveaux internes entre lesquels

s'effectue la transition. Deux effets sont responsables de cette différence : l'effet Doppler et l'effet de recul (Complément A_{XIX}) ; ils jouent un rôle important dans les méthodes de refroidissement laser.

- (iii) Si l'on pousse les calculs au-delà de l'approximation des grandes longueurs d'onde, on trouve qu'il faut ajouter à l'hamiltonien d'interaction des termes décrivant l'interaction entre le champ magnétique du rayonnement et les moments magnétiques orbital ou de spin des atomes. Une partie de ces termes a déjà été donnée en (C-6). Des transitions, appelées dipolaires magnétiques, peuvent alors apparaître entre niveaux de même parité, contrairement aux transitions dipolaires électriques étudiées plus haut. D'autres types de transition peuvent également apparaître à ces ordres supérieurs, comme les transitions quadropolaires.

Notons enfin que si l'état initial du rayonnement contient n_i photons, les deux derniers éléments de matrice de (C-34) et (C-35) valent $\langle n_i - 1 | \hat{a}_i | n_i \rangle = \sqrt{n_i}$ et $\langle n_i + 1 | \hat{a}_i^\dagger | n_i \rangle = \sqrt{n_i + 1}$. En présence de n_i photons incidents, la probabilité du processus d'absorption est donc proportionnelle à n_i alors que la probabilité d'émission est proportionnelle à $n_i + 1$. Nous verrons dans le Chapitre XX que cette différence est liée à l'existence de deux types d'émission, l'émission induite et l'émission spontanée.

Connaissant les expressions des divers hamiltoniens \hat{H}_A , \hat{H}_R et \hat{H}_I , ainsi que leurs éléments de matrice, nous pouvons maintenant résoudre l'équation de Schrödinger pour calculer les amplitudes de transition entre un état initial et un état final du système "atome + champ". Ce sera l'objet du chapitre suivant consacré à l'étude de divers processus, comme l'absorption ou l'émission de photons dans un rayonnement monochromatique ou de bande spectrale large, la photo-ionisation, les processus multiphotoniques, la diffusion de photons.

COMPLÉMENTS DU CHAPITRE XIX

Les trois compléments de ce chapitre étudient les conséquences des lois de conservation de l'impulsion totale et du moment cinétique total dans les processus d'absorption et d'émission de photons par des atomes. Lorsqu'un atome absorbe (ou émet) un photon, il gagne (ou perd) une énergie, une impulsion et un moment cinétique égaux à l'énergie, à l'impulsion et au moment cinétique du photon. Ceci permet de "manipuler" diverses propriétés des atomes, et fournit la base des méthodes du pompage optique et du refroidissement laser.

A_{XIX} : ÉCHANGES D'IMPULSION ENTRE ATOMES ET PHOTONS

Les échanges d'impulsion entre atomes et photons jouent un rôle important, en particulier pour déterminer l'effet Doppler et la forme des raies spectrales émises ou absorbées par des gaz. Lorsqu'un atome absorbe et ré-émet en permanence des photons, son impulsion peut beaucoup changer; ceci permet de le décélérer et de ralentir, voire immobiliser, un jet atomique sur des distances courtes. Diverses utilisations de l'effet Doppler permettent également d'introduire une force de friction qui ralentit les atomes, et d'obtenir ainsi des gaz ultrafroids. Lorsque les atomes sont confinés par un piège, la nature du déplacement Doppler peut être profondément modifiée, au point de disparaître (effet Mössbauer). Les processus multiphotoniques au cours desquels l'impulsion totale des photons absorbés est nulle sont également étudiés.

B_{XIX} : MOMENT CINÉTIQUE DU RAYONNEMENT

Ce complément est plus technique que le précédent. Il montre comment le photon peut être considéré comme une particule de spin 1; cette particule est également munie de moment cinétique orbital. Le photon possède donc deux types de moment cinétique. Ces notions sont utiles pour la lecture du complément suivant.

C_{XIX} : ÉCHANGES DE MOMENT CINÉTIQUE ENTRE ATOMES ET PHOTONS

Ce complément étudie les échanges entre le moment cinétique de spin des photons (lié à la polarisation du faisceau lumineux) et les degrés de liberté internes des atomes. Les échanges obéissent à des règles de sélection pour les transitions atomiques. Ces règles sont à la base de bien des méthodes expérimentales de la physique atomique, en particulier celle du "pompage optique" où l'action d'un faisceau lumineux polarisé permet d'accumuler les atomes d'un gaz dans certains sous-niveaux Zeeman. Ces méthodes donnent lieu à de nombreuses applications, dont ce complément fournit un résumé succinct.

Complément A_{XIX}

Echanges d'impulsion entre atomes et photons

1	Recul d'un atome libre absorbant ou émettant un photon	448
1-a	Lois de conservation	448
1-b	Effet Doppler, largeur Doppler	450
1-c	Énergie de recul	451
1-d	Force de pression de radiation dans une onde plane . . .	452
2	Applications de la force de pression de radiation : ralentissement et refroidissement des atomes	453
2-a	Décélération d'un jet atomique	453
2-b	Refroidissement laser Doppler d'atomes libres	454
2-c	Piège magnéto-optique	462
3	Blocage du recul par un confinement spatial	464
3-a	Hypothèses sur le potentiel extérieur de piégeage	464
3-b	Intensités des raies vibrationnelles	465
3-c	Influence du confinement sur les spectres d'absorption et d'émission	466
3-d	Cas particulier d'un potentiel harmonique à une dimension	467
3-e	Effet Mössbauer	468
4	Suppression du recul dans certains processus multiphotoniques	469

Dans le § C du Chapitre XIX, nous avons étudié les éléments de matrice de l'hamiltonien d'interaction entre l'atome et le champ. Des règles de sélection ont été ainsi établies, traduisant la conservation de l'impulsion totale du système "atome + champ" lors de l'absorption ou de l'émission de photons par l'atome. L'étude au Chapitre XX des amplitudes d'absorption et d'émission montrera que l'énergie globale du système est également conservée au cours de ces processus. Le but de ce complément est de montrer comment l'utilisation de ces lois de conservation¹ permet de comprendre bien des aspects intéressants des échanges d'impulsion entre atomes et photons.

Nous commençons au § 1 par étudier le cas d'un atome libre, dont le centre de masse n'est soumis à aucun potentiel extérieur. Nous établissons les expressions du déplacement Doppler et de l'énergie de recul qui apparaissent dans l'équation donnant la fréquence des photons absorbés ou émis. Dans un gaz contenant un grand nombre d'atomes de vitesses différentes, la dispersion de ces dernières se traduit par

1. La première étude de ce type est celle de l'effet Compton (1922), où la diffusion d'un photon par un électron est considérée comme une collision entre ces deux particules. On part des équations de conservation de l'impulsion totale et de l'énergie totale au cours de la collision, en attribuant au photon une énergie $h\nu$ et une impulsion $h\nu/c$. On obtient alors, pour la variation de fréquence du photon diffusé dans une direction donnée, une valeur que confirment les observations expérimentales.

un élargissement Doppler des raies d'émission et d'absorption. Cet élargissement, ainsi que le déplacement lié à l'énergie de recul, introduisent des modifications des raies observées en spectroscopie à haute résolution, et en limitent donc la précision. Un autre effet est que, lorsque l'atome absorbe et ré-émet en permanence des photons, son changement d'impulsion par unité de temps peut être considérable et donner naissance à une force de pression de radiation. Nous en calculons l'ordre de grandeur, et montrons qu'elle est capable de produire une décélération ou une accélération de l'atome pouvant être une centaine de milliers de fois plus élevée que celle due à la pesanteur.

Dans le § 2, nous montrons que cette force est capable de ralentir et d'immobiliser un jet atomique se propageant dans le sens opposé au faisceau lumineux. La dépendance en vitesse de la force de pression de radiation due à l'effet Doppler est également très intéressante. Elle permet, en utilisant des faisceaux lumineux de directions opposées, mais de même intensité et de même fréquence, de réaliser une force de friction lorsque cette fréquence est inférieure à la fréquence atomique : la force de pression de radiation est nulle quand la vitesse de l'atome v est nulle, mais opposée à v quand la vitesse est non nulle, de sorte qu'elle produit un amortissement de cette vitesse. C'est le principe de l'un des premiers mécanismes de refroidissement laser qui ait été mis en évidence expérimentalement. Les très basses températures qui ont été ainsi réalisées, des millions de fois plus basses que la température ambiante, expliquent le nombre croissant d'applications des atomes ultra-froids ainsi obtenus. Nous étudierons aussi au § 2-c le principe du piège magnéto-optique mettant en jeu une dépendance en position de la force de pression de radiation.

Nous décrivons dans les §§ 3 et 4 de ce complément un certain nombre de méthodes qui ont été développées pour supprimer ou contourner les effets liés au recul. Le confinement de l'atome dans un piège, étudié au § 3, peut empêcher l'atome de reculer si le confinement est suffisamment fort. Si la transition est multi-photonique, par exemple si 2 photons de même énergie et d'impulsions opposées sont absorbés au cours de la transition, le recul communiqué à l'atome est nul ; il n'y a plus d'effet Doppler. Un exemple important de cette méthode est la spectroscopie à deux photons sans effet Doppler (§ 4).

1. Recul d'un atome libre absorbant ou émettant un photon

Considérons tout d'abord le cas où l'atome n'est soumis à aucun potentiel extérieur (atome libre). L'hamiltonien \hat{H}_{ext} des variables externes se réduit au terme d'énergie cinétique $\hat{P}^2/2M$, où \hat{P} est l'impulsion du centre de masse et M est la masse totale de l'atome. Les états propres de \hat{H}_{ext} peuvent être choisis comme des états d'impulsion \mathbf{P} et d'énergie $P^2/2M$ bien définies.

1-a. Lois de conservation

Développons le champ de rayonnement en ondes planes de vecteur d'onde \mathbf{k} et de fréquence $\omega = ck$. Les états propres de l'hamiltonien du rayonnement \hat{H}_R peuvent être décrits en termes de photons d'énergie $\hbar\omega$ et d'impulsion $\hbar\mathbf{k}$. L'hamiltonien d'interaction \hat{H}_I étudié dans le § C du Chapitre XIX est invariant² par translation

2. L'hamiltonien d'interaction fait intervenir les valeurs des champs aux points où se trouvent les particules. Il reste donc invariant quand on déplace à la fois les champs et les particules (d'une

spatiale du système total “atome + champ”. Il commute donc avec l’impulsion totale de ce système, de sorte qu’il ne peut induire de transitions qu’entre états de même impulsion totale. De plus, l’amplitude de transition associée à une interaction de durée T ne peut relier que des états du système total ayant la même énergie totale, à \hbar/T près (nous reviendrons sur ce point plus en détail dans le chapitre suivant). Ces deux lois de conservation de l’impulsion et de l’énergie totales peuvent être utilisées pour étudier l’influence du mouvement du centre de masse de l’atome sur les fréquences des photons qu’il peut absorber ou émettre.

Considérons tout d’abord un processus d’absorption au cours duquel un atome passe d’un état interne a à un autre état interne b en absorbant un photon d’énergie $\hbar\omega$ et d’impulsion $\hbar\mathbf{k}$. Nous notons :

$$\hbar\omega_0 = E_b - E_a \tag{1}$$

la différence entre les énergies des deux états internes. L’impulsion initiale (finale) du centre de masse avant (après) l’absorption du photon est notée \mathbf{P}_{in} (\mathbf{P}_{fin}). La conservation de l’impulsion totale entraîne que :

$$\mathbf{P}_{\text{fin}} = \mathbf{P}_{\text{in}} + \hbar\mathbf{k} \tag{2}$$

L’énergie totale dans l’état initial est la somme de l’énergie du photon, de l’énergie interne de l’atome, et de son énergie de translation $P_{\text{in}}^2/2M$:

$$E_{\text{in}} = \hbar\omega + E_a + \frac{P_{\text{in}}^2}{2M} \tag{3}$$

Son énergie totale dans l’état final se réduit à l’énergie de l’atome puisque le photon a été absorbé :

$$E_{\text{fin}} = E_b + \frac{P_{\text{fin}}^2}{2M} \tag{4}$$

La conservation de l’énergie totale entraîne que $E_{\text{in}} = E_{\text{fin}}$. En utilisant (1) et (2), cette équation devient :

$$\hbar\omega = \hbar\omega_0 + \frac{\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\text{in}}}{M} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \tag{5}$$

Les deux derniers termes de (5) représentent la variation d’énergie externe de l’atome au cours de la transition – c’est-à-dire la variation de l’énergie cinétique du centre de masse de l’atome entre l’état final, où elle vaut $(\mathbf{P}_{\text{in}} + \hbar\mathbf{k})^2/2M$, et l’état initial, où elle vaut $P_{\text{in}}^2/2M$. Cette équation peut être ré-écrite sous la forme :

$$\omega = \omega_0 + \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{\text{in}} + \frac{E_{\text{rec}}}{\hbar} \tag{6}$$

où $\mathbf{v}_{\text{in}} = \mathbf{P}_{\text{in}}/M$ est la vitesse initiale du centre de masse et où :

$$E_{\text{rec}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} = \hbar\omega_R \tag{7}$$

même quantité).

est l'énergie de recul ; c'est l'énergie qu'un atome, initialement au repos, acquiert après absorption d'un photon d'impulsion $\hbar k$.

Le même type de calcul vaut pour un processus d'émission au cours duquel un atome, dont le centre de masse a l'impulsion initiale \mathbf{P}_{in} , passe de l'état interne b à l'état interne a en émettant un photon d'énergie $\hbar\omega$ et d'impulsion $\hbar\mathbf{k}$. L'équation (6) doit être remplacée par :

$$\omega = \omega_0 + \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{\text{in}} - \frac{E_{\text{rec}}}{\hbar} \quad (8)$$

où seul un signe a changé par rapport à (6).

1-b. Effet Doppler, largeur Doppler

Le terme $\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{\text{in}}$ des équations (6) et (8) n'est autre que le déplacement Doppler, dû au mouvement de l'atome, des fréquences qu'il absorbe ou qu'il émet. En posant :

$$\omega - \omega_0 = 2\pi(\nu - \nu_0) = 2\pi\Delta\nu \quad \text{et} \quad k = 2\pi\frac{\nu}{c} \quad (9)$$

on obtient, pour la variation de fréquence $\Delta\nu$ due à l'effet Doppler, l'expression :

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} = \frac{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{v}_{\text{in}}}{c} \quad (10)$$

où $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}/k$ est le vecteur unitaire définissant la direction de propagation du photon. Une théorie quantique du rayonnement n'est d'ailleurs pas indispensable pour rendre compte de ce déplacement de fréquence ; une théorie classique de l'effet Doppler le permet également. C'est logique puisque, des deux derniers termes de (6) et (8), $\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{\text{in}}$ est le seul qui ne tende pas vers zéro quand \hbar tend vers zéro, contrairement à $E_{\text{rec}}/\hbar = \hbar k^2/2M$ (qui est proportionnel à \hbar).

Pour un ensemble d'atomes dans un gaz dilué en équilibre thermique à la température T , les vitesses sont distribuées selon une loi de Maxwell-Boltzmann et la dispersion Δv de ces vitesses est de l'ordre de $\sqrt{k_B T/M}$ où k_B est la constante de Boltzmann. Les écarts $\Delta\nu$ des fréquences émises ou absorbées par l'atome sont distribuées suivant une courbe gaussienne³ dont la largeur $\Delta\nu_D$ (écart type de la distribution de fréquences, égal à la racine carrée de la variance), appelée *largeur Doppler*, est donnée par :

$$\frac{\Delta\nu_D}{\nu_0} = \sqrt{\frac{k_B T}{Mc^2}} \quad (11)$$

En général, dans le domaine optique et pour des températures de l'ordre de 300 K, la largeur Doppler $\Delta\nu_D$ est de l'ordre de 1GHz = 10^9 Hz, beaucoup plus petite que la fréquence ν_0 (de l'ordre de 10^{15} Hz), mais beaucoup plus grande que la largeur naturelle Γ , de l'ordre de 10^7 Hz. Dans ce domaine, la résolution des mesures spectroscopiques de fréquence des raies émises par un gaz dilué est généralement limitée par l'élargissement Doppler des raies.

3. En toute rigueur, cette distribution est le produit de convolution d'une gaussienne par une courbe de largeur Γ , où Γ est la largeur naturelle (due à l'émission spontanée) de la raie émise ou absorbée par les atomes. Pour un gaz à température ambiante, Γ est beaucoup plus petit que la largeur Doppler.

Effet Doppler relativiste

Les calculs précédents ne sont valables qu'à la limite non relativiste ($v \ll c$). L'expression du déplacement Doppler peut être généralisée pour des valeurs quelconques de v en notant que les quatre quantités $\{k_x, k_y, k_z, \omega/c\}$ sont les quatre composantes d'un quadrivecteur. Supposons l'atome au repos dans un référentiel R et émettant un photon de fréquence ω le long de l'axe x (nous ignorons ici l'énergie de recul). Un observateur dans un référentiel R' se déplaçant à la vitesse v le long de l'axe x voit l'atome s'éloigner à la vitesse $-v$ et mesure une fréquence ω' pour le photon émis par l'atome. D'après les expressions relativistes des transformations des coordonnées d'un quadrivecteur, on a :

$$\omega' = \frac{\omega - kv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (12)$$

Au premier ordre en v/c , en remplaçant $\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{\text{in}}$ par $-kv$ on retrouve bien le déplacement Doppler de l'équation (8) – la correction relativiste décrite par le dénominateur de (12) étant (en valeur relative) d'ordre v^2/c^2 pour $v \ll c$.

1-c. Énergie de recul

Supposons l'atome initialement immobile de sorte que les termes en $\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{\text{in}}$ dans (6) et (8) sont nuls. Quand l'atome absorbe un photon, son impulsion augmente d'une quantité $\hbar\mathbf{k}$ égale à l'impulsion du photon absorbé. L'atome recule donc avec une vitesse $v_{\text{rec}} = \hbar k/M$ dans la direction du photon incident, et son énergie cinétique devient égale à $E_{\text{fin}} = Mv_{\text{rec}}^2/2 = E_{\text{rec}}$. L'énergie $\hbar\omega$ du photon absorbé doit servir, d'une part à augmenter l'énergie interne de l'atome d'une quantité $\hbar\omega_0$ (puisque l'atome passe de a à b), d'autre part à augmenter son énergie cinétique de 0 à E_{rec} . On a donc $\hbar\omega = \hbar\omega_0 + E_{\text{rec}}$, ce qui correspond bien à (6) dans le cas particulier d'une vitesse initiale nulle. En revanche, dans un processus d'émission où l'atome passe de b à a en émettant un photon, cette relation est modifiée. En effet, comme le photon quitte l'atome avec une impulsion $\hbar\mathbf{k}$, l'atome recule avec la même impulsion dans la direction opposée et acquiert une énergie cinétique E_{rec} . La perte d'énergie interne de l'atome, égale à $\hbar\omega_0$, doit donc maintenant servir, d'une part à augmenter l'énergie du rayonnement d'une quantité $\hbar\omega$ égale à l'énergie du photon émis, d'autre part à augmenter l'énergie cinétique de l'atome de zéro à E_{rec} . On a alors $\hbar\omega_0 = \hbar\omega + E_{\text{rec}}$, c'est-à-dire $\hbar\omega = \hbar\omega_0 - E_{\text{rec}}$, ce qui redonne bien (8) avec un signe moins au second membre.

Le recul de l'atome avec une énergie cinétique E_{rec} entraîne donc que les centres des raies d'absorption et d'émission sont différents (Figure 1) ; ils sont situés en $\omega + \omega_R$ pour la raie d'absorption, et $\omega - \omega_R$ pour la raie d'émission, où $\omega_R = E_{\text{rec}}/\hbar$. Pour un gaz contenant un grand nombre d'atomes en mouvement, la dispersion des vitesses autour de la vitesse nulle entraîne que chacune de ces deux raies acquiert une largeur Doppler $\Delta\omega_D$. Dans le domaine optique, l'ordre de grandeur de la fréquence de recul ω_R est de quelques kHz, très inférieur à la largeur Doppler à température ambiante et même à la largeur naturelle. Le doublet de recul représenté sur la Figure 1 n'est donc pas résolu : la distance entre les sommets des deux pics est inférieure à leur largeur.

Cependant, si l'on étudie des raies émises par les noyaux dans le domaine X ou γ , la fréquence de recul (qui croît comme k^2) devient comparable ou même supérieure à la largeur Doppler (qui ne croît que comme k). Les deux raies de la Figure 1 ne se recouvrent alors que loin sur leurs ailes. Dans ce cas, le photon émis par un noyau

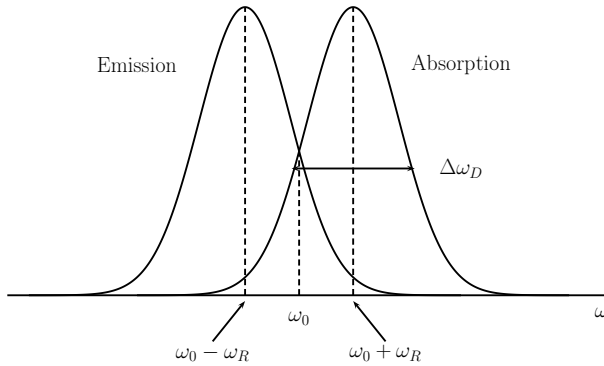


FIGURE 1 – A cause de l’effet de recul de l’atome, les deux raies d’absorption et d’émission ne coïncident pas, mais forment un doublet appelé doublet de recul ; elles sont centrées en $\omega + \omega_R$ pour la raie d’absorption et $\omega - \omega_R$ pour la raie d’émission. Dans un gaz, leur largeur est la largeur Doppler $\Delta\omega_D$.

dans un état excité b ne peut pratiquement plus être absorbé par un autre noyau identique dans l’état inférieur a . Nous verrons plus loin comment le recul du noyau peut être bloqué si la liaison de l’atome possédant ce noyau à d’autres atomes dans un cristal est suffisamment forte (effet Mössbauer).

1-d. Force de pression de radiation dans une onde plane

Chaque fois que l’atome absorbe un photon, il gagne une impulsion $\hbar\mathbf{k}$. Si \dot{N}_{abs} est le nombre d’absorptions par unité de temps, l’atome gagne donc une impulsion $\dot{N}_{\text{abs}}\hbar\mathbf{k}$ par unité de temps. En régime stationnaire, le nombre d’absorptions \dot{N}_{abs} par unité de temps est égal au nombre d’émissions \dot{N}_{em} par unité de temps. Ce dernier est lui-même égal à $\Gamma\sigma_{bb}$, où Γ est la largeur naturelle de l’état excité de l’atome, et où l’élément diagonal σ_{bb} dans b de l’opérateur densité de l’atome est la probabilité d’occupation de cet état. Le gain d’impulsion par unité de temps de l’atome peut être considéré comme résultant d’une force agissant sur lui et associée à la pression de radiation exercée par le faisceau lumineux sur l’atome. Cette force est appelée “force de pression de radiation”. D’après ce qui précède, elle est égale à ⁴ :

$$\mathbf{F} = \dot{N}_{\text{abs}}\hbar\mathbf{k} = \Gamma\sigma_{bb}\hbar\mathbf{k} \quad (13)$$

Pour évaluer un ordre de grandeur de cette force, supposons que l’intensité lumineuse soit très grande ; la transition atomique est alors saturée, de sorte que les probabilités d’occupation σ_{bb} et σ_{aa} de l’état supérieur b et de l’état inférieur a de

4. Pour calculer la variation d’impulsion, nous n’avons tenu compte ici que des processus d’absorption de photons. Les processus d’émission spontanée changent aussi l’impulsion de l’atome, puisque l’atome recule quand il émet un photon. Mais le photon émis spontanément l’est dans toutes les directions de l’espace, de sorte que le changement de l’impulsion de l’atome est nul en moyenne. Par contre, il donne naissance à une diffusion de l’impulsion, augmentant la dispersion des vitesses de l’atome. Nous verrons au § 2-b- γ qu’il faut tenir compte de cette diffusion d’impulsion pour évaluer les limites du refroidissement laser.

l'atome sont toutes deux égales à $1/2$. On a alors :

$$\mathbf{F} = \hbar \mathbf{k} \frac{\Gamma}{2} \tag{14}$$

Une telle force peut communiquer à l'atome de masse M une accélération \mathbf{A} égale à \mathbf{F}/M , c'est-à-dire encore, compte tenu de (14), à :

$$\mathbf{A} = \frac{\hbar \mathbf{k} \Gamma}{M 2} = \frac{\mathbf{v}_{\text{rec}}}{2\tau_R} \tag{15}$$

où $\mathbf{v}_{\text{rec}} = \hbar \mathbf{k}/M$ est la vitesse de recul d'un atome absorbant ou émettant un photon, et $\tau_R = 1/\Gamma$ la durée de vie radiative de l'état excité b .

Calculons la valeur de cette accélération pour un atome de sodium. La vitesse de recul est de l'ordre de $3 \times 10^{-2} \text{m/s}$ et la durée de vie radiative de l'ordre de $16.2 \times 10^{-9} \text{s}$, de sorte que l'accélération A est de l'ordre de 10^6m/s^2 , soit 10^5 fois plus grande que l'accélération due à la pesanteur, égale à 10m/s^2 ! Cette valeur élevée de A est due au fait que le changement de vitesse de l'atome v_{rec} par cycle d'absorption-émission, bien que très faible, s'accumule durant un très grand nombre de cycles $1/2\tau_R$ effectués par seconde.

2. Applications de la force de pression de radiation : ralentissement et refroidissement des atomes

Nous étudions maintenant trois applications de la force de pression de radiation utilisant, soit un faisceau laser, soit deux faisceaux laser de même intensité et de même fréquence, se propageant dans deux directions opposées le long de l'axe x . Nous verrons au § 2-a comment, avec un seul faisceau laser, la force de pression de radiation exercée par ce faisceau sur les atomes d'un jet atomique se propageant dans le sens opposé peut être utilisée pour ralentir, voire immobiliser, les atomes du jet. Avec deux faisceaux laser se propageant en sens opposés, des effets intéressants apparaissent si l'on est capable d'introduire un déséquilibre entre les deux forces de pression de radiation dépendant, soit de la vitesse v de l'atome le long de l'axe x , soit de sa position x . Nous étudions au § 2-b comment obtenir cette dépendance en vitesse et comment la somme F des deux forces exercées par les deux ondes, nulle pour $v = 0$, devient pour $v \neq 0$ une fonction non nulle qui, pour v suffisamment petit, est linéaire en v ; on peut alors l'écrire $F \simeq \alpha v$. Si le désaccord en fréquence des deux lasers est adéquat, le coefficient α peut être négatif, de sorte que la force totale apparaît alors comme une force de friction pouvant amortir les vitesses de tous les atomes du jet et donc les refroidir. C'est le principe du refroidissement laser Doppler. Dans le § 2-c, nous montrons comment une dépendance en position peut être obtenue et comment la force totale, nulle pour $x = 0$, devient non nulle pour $x \neq 0$ et égale à βx pour x suffisamment petit. Si β est négatif, cette force est une force de rappel pouvant piéger les atomes autour de $x = 0$. C'est le principe du piège magnéto-optique.

2-a. Décélération d'un jet atomique

Supposons qu'un jet atomique soit irradié par un faisceau laser résonnant se propageant en sens opposé de la direction du jet. Sous l'effet de la force de pression

de radiation, les atomes du jet vont être ralentis. Peut-on parvenir à les immobiliser ? Une remarque importante est que, même si le faisceau laser est initialement résonnant, il va cesser de l'être dès que la vitesse des atomes change, puisque l'effet Doppler fait sortir les atomes de résonance ; ceci diminue de manière importante la force de pression de radiation, et donc l'effet de ralentissement. Dans un premier temps toutefois, et afin de simplifier l'exposé, nous ignorons l'effet Doppler consécutif au changement de vitesse des atomes ; nous verrons plus loin comment il est effectivement possible de s'en affranchir.

Nous commençons donc par supposer que la force de pression de radiation ne change pas au cours du processus de décélération et que l'intensité laser est suffisamment élevée pour que la transition atomique soit saturée ; on peut alors utiliser les ordres de grandeur calculés dans le paragraphe précédent. Pour des atomes de sodium, la décélération A des atomes est donc de l'ordre de 10^6 m/s². Si les atomes du jet ont initialement une vitesse de l'ordre de 10^3 m/s, leur vitesse sera nulle au bout d'un temps T de l'ordre de 10^{-3} s et ils auront parcouru une distance $AT^2/2$ de l'ordre de 0.5 m, ce qui montre que les dimensions d'une telle expérience ne sont pas a priori excessives.

Pour résoudre le problème de la sortie de résonance des atomes à cause de l'effet Doppler qui change au cours du ralentissement, une méthode ingénieuse a été proposée et mise en œuvre [17]. Elle consiste à faire propager les atomes dans un champ magnétique spatialement inhomogène. Plus précisément, le jet atomique se propage à l'intérieur d'un solénoïde à enroulement variable dont l'axe coïncide avec celui du jet. Le champ magnétique produit par le solénoïde est parallèle à la direction du jet et son intensité varie le long de l'axe du jet. L'atome se propageant dans ce champ subit un déplacement Zeeman de sa fréquence de résonance. On peut alors ajuster le profil du champ pour que la variation Zeeman de la fréquence atomique compense la variation de la fréquence du laser que ressent l'atome pendant qu'il est ralenti : en chaque point x , le champ est calculé pour que les deux changements de fréquence restent égaux. Un tel dispositif est appelé "ralentisseur Zeeman" (en anglais "Zeeman slower").

2-b. Refroidissement laser Doppler d'atomes libres

α. Principe du refroidissement laser Doppler

Le ralentisseur décrit ci-dessus diminue la vitesse moyenne des atomes, et peut même l'annuler. L'écart quadratique des vitesses atomiques reste cependant non nul. Or c'est lui, et non la vitesse moyenne, qui caractérise la température des atomes. Nous décrivons maintenant une méthode utilisant la dépendance en vitesse de la force de pression de radiation due à l'effet Doppler, qui permet de réduire la dispersion des vitesses atomiques autour de leur valeur moyenne, et donc de véritablement refroidir les atomes. Comme cette méthode utilise l'effet Doppler, elle est appelée "refroidissement laser Doppler". Elle a été suggérée en 1975 pour des atomes libres [18] et des ions piégés [19]. Nous nous limiterons ici au cas des atomes libres.

L'idée consiste à utiliser deux ondes laser 1 et 2, de même fréquence angulaire ω et de même intensité, se propageant dans des sens opposés le long de l'axe Ox , l'onde 1 vers les x négatifs, l'onde 2 vers les x positifs (Figure 3). Considérons un atome se propageant lui aussi le long de l'axe Ox avec par exemple une vitesse v positive. Soit ω_0 la fréquence angulaire de la transition atomique $a \leftrightarrow b$ excitée par

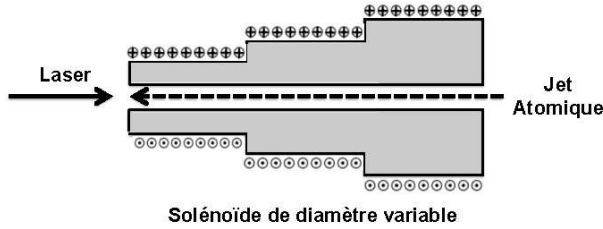


FIGURE 2 – Schéma de principe d'un ralentisseur Zeeman. Le jet atomique est ralenti par un faisceau laser se propageant en sens inverse. Il passe au centre d'un solénoïde constitué d'un ensemble de bobines magnétiques de diamètre de plus en plus petit, représenté en coupe (les spires de courant traversent perpendiculairement la figure). Les atomes sont ainsi soumis à un champ magnétique de plus en plus grand. Le déplacement Zeeman de leur fréquence de résonance optique peut donc suivre le déplacement Doppler de la fréquence apparente du laser dans leur référentiel propre. Ainsi, au lieu de sortir de résonance, ils sont ralentis durant toute leur propagation au sein du solénoïde, et peuvent même être stoppés.

le laser. On suppose que le laser est désaccordé vers le rouge, c'est-à-dire que :

$$\omega < \omega_0 \tag{16}$$

Dans le référentiel au repos de l'atome, la fréquence apparente de l'onde i (avec $i = 1, 2$) est déplacée par effet Doppler et vaut $\omega - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{v}$. Comme v est positif, l'atome et l'onde 1 se propagent dans des sens opposés, de sorte que $\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{v}$ est négatif. La fréquence apparente $\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}$ de l'onde 1 est donc augmentée. L'effet Doppler rapproche donc la fréquence apparente de l'onde 1 de la fréquence de résonance de l'atome, de sorte que la force de pression de radiation F_1 exercée par l'onde 1 sur l'atome, qui est orientée comme l'onde 1 vers les x négatifs, augmente en module par rapport à sa valeur pour $v = 0$. Les conclusions sont opposées pour l'onde 2, que l'effet Doppler éloigne de résonance ; elle crée une force F_2 , dirigée vers les x positifs qui est plus faible que sa valeur pour $v = 0$.

La somme des deux forces⁵ s'annule pour $v = 0$ (elles sont alors égales en module et opposées), mais n'est plus nulle pour $v \neq 0$; pour v positif, elle a la même direction que F_1 puisque le module de F_1 est alors supérieur à celui de F_2 (Figure 3) ; pour v négatif, c'est le contraire puisque les rôles des deux ondes sont échangés. La somme $\mathbf{F} = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2$ des deux forces de pression de radiation exercées par les deux ondes a donc une direction opposée à celle de v . Pour des valeurs faibles de v , elle varie linéairement en v et peut s'écrire :

$$\mathbf{F} = -\gamma \mathbf{v} \tag{17}$$

où γ est un coefficient de friction positif.

Sous l'effet de cette force de friction, les vitesses atomiques sont constamment réduites. Leur dispersion ne tend pas cependant vers zéro aux longs temps d'interaction, à cause des fluctuations nécessairement présentes dans les processus d'émission

5. Nous verrons plus loin qu'on peut ignorer les interférences entre les effets des deux ondes.

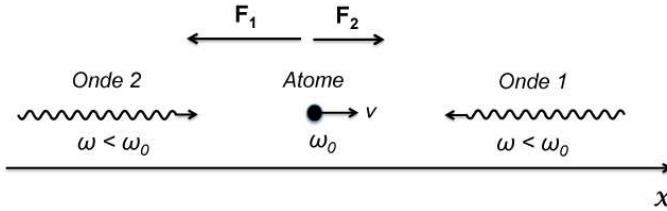


FIGURE 3 – Principe du refroidissement laser Doppler. Un atome de vitesse v le long de l’axe Ox interagit avec deux ondes laser 1 et 2 de même fréquence angulaire ω ; cette fréquence est désaccordée vers le rouge par rapport à la transition atomique ($\omega < \omega_0$). Les deux ondes ont la même intensité mais se propagent dans des sens opposés le long de l’axe Ox . La direction de la vitesse v est opposée à celle de l’onde 1. Dans le référentiel de l’atome, l’effet Doppler rapproche alors la fréquence de l’onde 1 de résonance, mais éloigne celle de l’onde 2. La force F_1 exercée par l’onde 1 augmente donc en module, alors que la force F_2 exercée par l’onde 2 diminue. La force totale, nulle pour $v = 0$, est donc opposée à v pour $v \neq 0$ et linéaire en v pour v suffisamment petit. Le résultat est équivalent à une force de friction.

et d’absorption. Il y a donc une compétition entre l’effet de friction que nous venons de décrire, qui tend à refroidir les atomes, et la diffusion d’impulsion qui tend à les chauffer. Nous évaluons dans les paragraphes suivants les effets de ces deux processus pour estimer l’ordre de grandeur des températures qui peuvent être obtenues par le refroidissement laser Doppler.

β . Estimation du coefficient de friction

Nous posons :

$$\bar{\omega}_0 = \omega_0 - \omega_R \quad (18)$$

où $\hbar\omega_R$ est l’énergie de recul définie en (7), et appelons δ le désaccord entre la fréquence ω des lasers et la fréquence $\bar{\omega}_0$:

$$\delta = \omega - \bar{\omega}_0 \quad (19)$$

Nous supposons à partir de maintenant que l’intensité des deux lasers est faible ; la transition atomique n’est alors pas saturée, et la population σ_{bb} du niveau excité b reste alors elle aussi faible. Ses variations en fonction du désaccord δ sont celles d’une courbe lorentzienne de largeur totale à mi-hauteur Γ :

$$\sigma_{bb}(\delta) = \sigma_{bb}(0) \frac{(\Gamma/2)^2}{[(\Gamma/2)^2 + \delta^2]} \quad (20)$$

Il se trouve que nous n’aurons pas besoin de l’expression de $\sigma_{bb}(0)$, car elle disparaît dans les expressions des coefficients de friction et diffusion que nous obtiendrons plus loin ; elle peut cependant être trouvée dans le Chapitre V de la référence [20] (équations de Bloch optiques).

Dans une approche perturbative du problème, deux types de termes sont à considérer : des termes “carrés” provenant de l’interaction du dipôle induit par l’onde

i avec la même onde i ; des termes “rectangles” provenant de l’interaction du dipôle induit par l’onde i avec l’autre onde $j \neq i$. Les termes rectangles correspondent à des interférences entre les effets des deux ondes. Cependant, comme les deux ondes n’ont pas la même dépendance spatiale (elles se propagent dans des sens opposés), ces effets d’interférence varient rapidement dans l’espace en $\exp(\pm 2ikx)$. Ils disparaissent donc quand les forces sont moyennées sur des distances de l’ordre de la longueur d’onde des lasers, ce que nous supposons être le cas. Il est alors possible de considérer que la force de pression de radiation agissant sur l’atome est simplement la somme des forces de pression de radiation exercées par chaque onde, comme si elle était seule.

Si l’atome est immobile, les deux ondes ont la même fréquence dans son référentiel, et donc le même désaccord δ ; rappelons que δ est supposé négatif pour une expérience de refroidissement laser – cf. (16). Si l’atome est en mouvement avec une vitesse $v > 0$, nous avons vu plus haut que la fréquence apparente de l’onde 1 est augmentée d’une quantité kv (où k et v sont positifs), de sorte que le désaccord pour l’interaction de l’atome avec l’onde 1 est égal à :

$$\delta_1 = \delta + kv \tag{21}$$

La population $\sigma_{bb}(\delta + kv)$ créée dans l’état excité par l’interaction avec l’onde 1 est donc égale à l’ordonnée du point B d’abscisse $\delta_1 = \delta + kv$ sur la Figure 4. Le même raisonnement permet de montrer que la fréquence apparente de l’onde 2 est égale à $\delta_2 = \delta - kv$ et que la population $\sigma_{bb}(\delta - kv)$ créée dans l’état excité par l’interaction avec l’onde 2 est égale à l’ordonnée du point C d’abscisse $\delta - kv$ sur la figure. Des calculs analogues à ceux du § 1 permettent alors de calculer la force totale F agissant sur l’atome, égale à la somme des deux forces exercées par chaque onde ajoutées indépendamment l’une de l’autre :

$$F = -\Gamma \hbar k \sigma_{bb}(\delta + kv) + \Gamma \hbar k \sigma_{bb}(\delta - kv) \tag{22}$$

où $\sigma_{bb}(\delta)$ est la fonction définie par le second membre de (20).

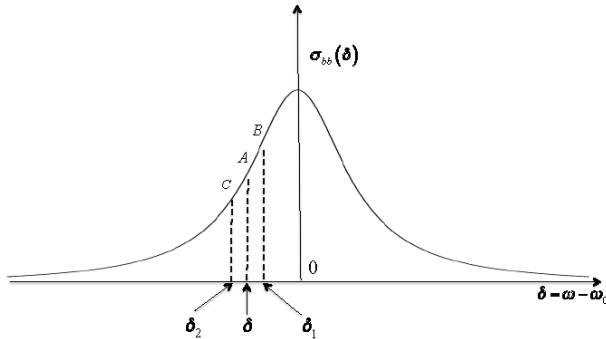


FIGURE 4 – Populations $\sigma_{bb}(\delta_1)$ et $\sigma_{bb}(\delta_2)$ excitées dans l’état supérieur b par l’onde 1, de désaccord δ_1 , et l’onde 2, de désaccord δ_2 . Comme le désaccord δ pour $v = 0$ est négatif, l’ordonnée $\sigma_{bb}(\delta_1)$ du point B est supérieure à l’ordonnée à $\sigma_{bb}(\delta_2)$ du point C .

Si kv est petit devant la largeur Γ de la courbe de la figure 4, on peut développer $\sigma_{bb}(\delta \pm kv)$ au premier ordre en kv et obtenir :

$$F = -2kv \Gamma \hbar k \frac{d}{d\delta} \sigma_{bb}(\delta) \quad (23)$$

Le calcul du dernier terme du membre de droite de (23), qui représente la pente au point A d'abscisse δ de la courbe donnant $\sigma_{bb}(\delta)$, peut être fait à partir de (20). Pour le point $\delta = -\Gamma/2$ où la pente est maximale, on trouve que :

$$\frac{d}{d\delta} \sigma_{bb}(\delta) = \frac{2\sigma_{bb}(\delta)}{\Gamma} \quad (24)$$

En reportant (24) dans (23), on obtient :

$$F = -\gamma v \quad (25)$$

où le coefficient de friction γ est donné par :

$$\gamma = 4\hbar k^2 \sigma_{bb}(\delta) \quad (26)$$

L'équation (25) permet également de calculer l'amortissement de l'impulsion p et de son carré. Comme $F = dp/dt$ et $v = p/M$, on a :

$$\frac{dp}{dt} = -\gamma \frac{p}{M} \quad (27)$$

Par ailleurs, on peut écrire :

$$\frac{d}{dt} p^2 = 2p \frac{dp}{dt} = -2\gamma \frac{p^2}{M} \quad (28)$$

Comme le coefficient de friction γ est indépendant de p , l'équation (28) demeure valable si on remplace p par l'impulsion totale $P = \sum_i p_i$ d'un ensemble de particules d'impulsion p_i . Ceci conduit à l'équation :

$$\frac{d}{dt} P^2 = -2\gamma \frac{P^2}{M} \quad (29)$$

qui fournit la valeur du coefficient d'amortissement pour une transition non saturée.

Nous abordons maintenant le problème de la température ultime pouvant être atteinte par le refroidissement laser Doppler. Si les seuls mécanismes intervenant dans ce problème étaient cette friction, d'après (27) et (28) l'impulsion totale et le carré de l'impulsion totale tendraient vers zéro aux temps longs, conduisant vers une température nulle. Cependant, même si on attend suffisamment longtemps pour que la valeur moyenne $\langle P \rangle$ de l'impulsion totale soit pratiquement nulle, ce n'est pas pour autant que $\langle P^2 \rangle$ s'annule également. En effet, les fluctuations des processus d'absorption et d'émission donnent naissance à des photons émis dans des directions aléatoires ; si leur l'impulsion totale est nulle en moyenne, ce qui fait que $\langle P \rangle$ n'est pas changé, elle présente des fluctuations, ce qui modifie $\langle P^2 \rangle$. Cet effet est assimilable à une source de bruit (encore appelée diffusion d'impulsion) qui augmente $\langle P^2 \rangle$, et agit donc en sens opposé à celui de la friction. C'est la compétition entre ces deux mécanismes opposés qui conduit à un état d'équilibre, dont l'énergie $\langle P^2 \rangle / 2m$ détermine la température limite obtenue.

γ . *Diffusion d'impulsion*

Commençons par étudier la diffusion d'impulsion de l'atome due aux photons émis spontanément. Considérons un intervalle de temps dt dont nous préciserons plus loin la valeur. Soient dN_1 et dN_2 les nombres de photons des ondes 1 et 2 absorbés pendant cet intervalle de temps. Comme nous supposons que la friction a déjà agi suffisamment longtemps pour annuler la vitesse moyenne, le désaccord δ est devenu très petit. On a donc, en valeur moyenne :

$$\langle dN_1 \rangle = \langle dN_2 \rangle = dN \quad (30)$$

Chaque photon absorbé donne ensuite naissance à un photon émis spontanément. Nous allons prendre ici un modèle simple à une dimension : on suppose que chaque photon est émis spontanément de manière aléatoire, soit dans la direction des x positifs (le recul de l'atome est alors négatif), soit dans la direction des x négatifs (le recul est alors positif). La variation d'impulsion de l'atome est ainsi $\xi_i \hbar k$, avec $\xi_i = -1$ dans le premier cas, $\xi_i = +1$ dans le second. Aucune corrélation n'existe entre les directions de deux photons successifs. L'impulsion totale dP gagnée par l'atome pendant l'intervalle de temps dt est égale à la somme de l'impulsion gagnée par absorption des photons du faisceau 1, de l'impulsion gagnée par absorption des photons du faisceau 2, et enfin de celle provenant des émissions spontanées :

$$dP = \hbar k \left[dN_2 - dN_1 + \sum_{i=1}^{2dN} \xi_i \right] \quad (31)$$

(i) Dans un premier temps, nous négligeons les fluctuations des nombres de photons absorbés dans chaque onde (nous revenons plus loin sur ce point). Les nombres dN_1 et dN_2 sont alors égaux à leurs valeurs moyennes, de sorte que :

$$dP = \hbar k \sum_{i=1}^{2dN} \xi_i \quad (32)$$

La somme sur i de (31) ne contribue pas à $\langle dP \rangle$, puisque la somme des ξ_i s'annule en moyenne, mais il n'en est pas de même pour la contribution à $\langle dP^2 \rangle$ que nous évaluons maintenant. Quand on élève au carré la somme sur i de (32), les termes rectangles $\langle \xi_i \xi_j \rangle$ avec $i \neq j$ sont nuls en moyenne à cause de l'absence de corrélations entre les signes de ξ_i et ξ_j . Restent les termes carrés $\langle \xi_i^2 \rangle$ qui sont tous égaux à 1. On obtient ainsi :

$$\langle dP^2 \rangle = 2 dN \hbar^2 k^2 \quad (33)$$

qui est visiblement non nul.

Précisons maintenant l'intervalle de temps dt , que nous prenons comme un intervalle suffisamment long pour que le nombre d'absorptions dN et d'émissions spontanées soit grand, mais suffisamment court pour que les variations de σ_{bb} restent négligeables. On peut alors écrire :

$$dN = \dot{N} dt = \Gamma \sigma_{bb}(\delta) dt \quad (34)$$

la dernière égalité résultant du fait que le nombre moyen de photons absorbés par unité de temps dans chaque onde est égal à $\Gamma \sigma_{bb}(\delta)$, comme nous l'avons vu plus

haut. Si nous reportons ce résultat dans (33), nous obtenons l'accroissement de $\langle P^2 \rangle$ pendant l'intervalle de temps dt :

$$\langle dP^2 \rangle = 2\hbar^2 k^2 dN = 2\hbar^2 k^2 \Gamma \sigma_{bb}(\delta) dt \quad (35)$$

Il vient finalement :

$$\left(\frac{d\langle P^2 \rangle}{dt} \right)_{\text{sp}} = 2\hbar^2 k^2 \Gamma \sigma_{bb}(\delta) = D_{\text{sp}} \quad (36)$$

L'indice inférieur "sp" de la parenthèse signifie que cet accroissement de $\langle P^2 \rangle$ par unité de temps est dû à des processus d'émission spontanée. Cette quantité est souvent appelée "coefficient de diffusion" D_{sp} .

(ii) Etudions maintenant l'effet des fluctuations des nombres dN_1 et dN_2 de photons absorbés dans chaque onde pendant le temps dt . Si l'on ne néglige plus ces fluctuations, il faut écrire :

$$dN_i = \langle dN_i \rangle + \delta n_i = dN + \delta n_i \quad (37)$$

avec $i = 1, 2$. Dans cette équation, δn_i est la fluctuation du nombre de photons absorbés dans l'onde i (la valeur moyenne de δn_i est nulle par définition). L'impulsion totale dP transmise à l'atome par absorption de photons est égale à :

$$dP = \hbar k (dN_2 - dN_1) = \hbar k (\delta n_2 - \delta n_1) \quad (38)$$

Comme les valeurs moyennes de δn_1 et δn_2 sont nulles, les fluctuations dues à l'absorption ne changent pas la valeur moyenne $\langle P \rangle$, mais il n'en est pas de même pour $\langle P^2 \rangle$. En élevant (38) au carré, et en utilisant le fait que les fluctuations de δn_1 et δn_2 sont incorrélées (la valeur moyenne de leur produit est nulle), on obtient :

$$\langle dP^2 \rangle = \left[\langle \delta n_1^2 \rangle + \langle \delta n_2^2 \rangle \right] \hbar^2 k^2 \quad (39)$$

Pour calculer $\langle \delta n_i^2 \rangle$, élevons au carré l'équation (37). Il vient :

$$dN_i^2 = dN^2 + 2 dN \delta n_i + \delta n_i^2 \quad (40)$$

Prenons la valeur moyenne des deux membres de cette équation. En utilisant le fait que la valeur moyenne de δn_i est nulle, on obtient :

$$\langle \delta n_i^2 \rangle = \langle dN_i^2 \rangle - dN^2 \quad (41)$$

Ainsi $\langle dN_i^2 \rangle - dN^2$ n'est autre que l'écart quadratique moyen du nombre de photons absorbés dans l'onde. En général, pour une statistique poissonnienne, on a⁶ :

$$\langle dN_i^2 \rangle - \langle dN_i \rangle^2 = \langle dN_i \rangle = dN \quad (42)$$

On en déduit que $\langle \delta n_i^2 \rangle$ est simplement égal à dN , de sorte que l'équation (39) se réduit à :

$$\langle dP^2 \rangle = 2 dN \hbar^2 k^2 \quad (43)$$

6. On pourrait calculer les effets des écarts à la statistique poissonnienne, mais pour simplifier nous ne le ferons pas ici ; c'est légitime à faible intensité du laser (transition non saturée), comme nous l'avons supposé.

Nous obtenons ainsi pour l'accroissement de $\langle P^2 \rangle$ dû aux fluctuations des processus d'absorption un résultat identique à (33). Les calculs conduisant de (33) à (36) peuvent être répétés et conduisent au résultat suivant pour l'accroissement par unité de temps de $\langle P^2 \rangle$ dû aux processus d'absorption :

$$\left(\frac{d\langle P^2 \rangle}{dt} \right)_{\text{abs}} = 2\hbar^2 k^2 \Gamma \sigma_{bb}(\delta) = D_{\text{abs}} \quad (44)$$

où le coefficient de diffusion D_{abs} dû aux processus d'absorption est égal à celui D_{sp} des processus d'émission spontanée :

$$D_{\text{abs}} = D_{\text{sp}} = 2\hbar^2 k^2 \Gamma \sigma_{bb}(\delta) \quad (45)$$

Pour évaluer la vitesse globale de variation de $\langle P^2 \rangle$, nous devons enfin ajouter aux vitesses de variation (36) et (44) celle due au refroidissement. Compte tenu de (29), nous pouvons écrire cette dernière sous la forme :

$$\left(\frac{d\langle P^2 \rangle}{dt} \right)_{\text{refr}} = -2\gamma \frac{\langle P^2 \rangle}{M} \quad (46)$$

Par somme de (36), (44) et (46), nous obtenons finalement une vitesse de variation totale égale à :

$$\left(\frac{d\langle P^2 \rangle}{dt} \right)_{\text{tot}} = -2\gamma \frac{\langle P^2 \rangle}{M} + D_{\text{sp}} + D_{\text{abs}} \quad (47)$$

Cette variation s'annule quand :

$$\langle P^2 \rangle = (D_{\text{sp}} + D_{\text{abs}}) \frac{M}{2\gamma} \quad (48)$$

En divisant les deux membres de cette équation par $2M$ et en utilisant les expressions (26) et (45) des coefficients de friction et de diffusion, on obtient finalement⁷ l'expression de l'énergie cinétique moyenne en régime stationnaire :

$$\frac{\langle P^2 \rangle}{2M} = \frac{\hbar\Gamma}{4} \quad (49)$$

La température limite obtenue est donc directement liée à la largeur naturelle du niveau excité.

δ . *Température Doppler*

Pour le refroidissement laser Doppler, et dans un problème à une dimension, l'énergie cinétique moyenne des fluctuations de vitesse autour de la valeur moyenne permet d'introduire une température Doppler T_D par :

$$\frac{\langle P^2 \rangle}{2M} = \frac{k_B T_D}{2} \quad (50)$$

7. Les coefficients de diffusion et le coefficient de friction sont tous proportionnels à $\sigma_{bb}(\delta)$, ce qui explique pourquoi $\sigma_{bb}(\delta)$ disparaît de (48) et n'apparaît donc pas dans (49).

où k_B est la constante de Boltzmann. De (49) et (50) on déduit que la température d'équilibre pouvant être atteinte par refroidissement laser Doppler est donnée par :

$$T_D = \frac{\hbar\Gamma}{2k_B} \quad (51)$$

Pour le sodium, cette température est égale à $235 \times 10^{-6} K$, soit près de 10^6 fois plus basse que la température ambiante (de l'ordre de $300 K$) !

Notre traitement du refroidissement laser Doppler repose cependant sur plusieurs approximations, comme le fait de se limiter à une dimension et la description simplifiée de l'émission spontanée ne se produisant que dans deux directions opposées. Des calculs plus précis conduisent à la conclusion que l'énergie cinétique moyenne atteinte en régime stationnaire est effectivement de l'ordre de $\hbar\Gamma$, à des coefficients numériques de quelques unités près.

Enfin, nous pouvons déduire de l'équation (49) une estimation de la vitesse \bar{v}_D des atomes ainsi refroidis :

$$\bar{v}_D \simeq \sqrt{\hbar\Gamma/M} \quad (52)$$

Les déplacements Doppler $\pm k\bar{v}_D$ des fréquences apparentes des ondes 1 et 2 sont alors tels que la séparation des lignes verticales en pointillé sur la Figure 4 est de l'ordre de $\pm k\sqrt{\hbar\Gamma/M}$. On peut donc comparer ces déplacements Doppler à la largeur Γ de la courbe de la Figure 4 et obtenir :

$$\frac{k\sqrt{\hbar\Gamma/M}}{\Gamma} \simeq \sqrt{\frac{\hbar k^2/M}{\Gamma}} \simeq \sqrt{\frac{E_{\text{rec}}}{\hbar\Gamma}} \quad (53)$$

où E_{rec} est l'énergie de recul donnée en (7). Le rapport $E_{\text{rec}}/\hbar\Gamma$ est en général petit avec les raies de résonance atomique utilisées pour le refroidissement laser ; il est de l'ordre de $1/100$ pour le sodium, ce qui montre que $k\bar{v}_D$ reste petit devant Γ et justifie le développement limité utilisé dans l'équation (23).

Autres méthodes de refroidissement laser

Nous n'avons décrit ci-dessus que les méthodes de refroidissement laser utilisant l'effet Doppler. D'autres méthodes ont été proposées et mises en oeuvre, comme le "refroidissement Sisyphe" (§ 4 du Complément D_{XX} et [21]) et le "refroidissement par évaporation" [22].

2-c. Piège magnéto-optique

Pour introduire un déséquilibre dépendant de la position x de l'atome entre les deux faisceaux laser 1 et 2 se propageant en sens opposés le long de l'axe Ox , il faut réaliser des désaccords (entre la fréquence des lasers et la fréquence atomique) dépendant de la position x de l'atome le long de l'axe Ox , égaux quand $x = 0$ et différents quand $x \neq 0$. Il faut alors nécessairement utiliser un atome ayant plusieurs sous-niveaux Zeeman et des polarisations différentes pour les deux faisceaux 1 et 2. Le principe de la méthode, suggérée pour la première fois par Jean Dalibard en 1986, est représenté sur la Figure 5. Nous supposons que la transition atomique est une transition entre un niveau fondamental de moment cinétique nul ($J_g = 0$) et un niveau excité de moment cinétique égal à 1 ($J_e = 1$). Les droites en traits pleins de la Figure 5 représentent les énergies des trois sous-niveaux Zeeman de l'état excité

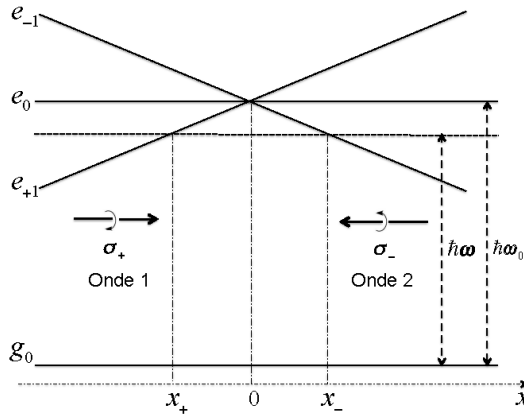


FIGURE 5 – Principe du piège magnéto-optique. La transition utilisée est une transition $J_g = 0 \rightarrow J_e = 1$ excitée par 2 ondes laser 1 et 2 se propageant en sens opposés le long de l'axe Ox avec des polarisations (σ_+) et (σ_-) par rapport à l'axe de quantification Ox . Un gradient de champ magnétique est appliqué le long de l'axe Ox , le champ magnétique étant nul en $x = 0$. L'onde 1, qui excite la transition $g_0 \leftrightarrow e_{+1}$, est résonnante avec cette transition au point d'abscisse $x = x_+$ et la force de pression de radiation qu'elle exerce sur les atomes est alors maximale. En ce point, l'onde 2, qui excite la transition $g_0 \leftrightarrow e_{-1}$, est désaccordée par rapport à la résonance atomique ; elle exerce donc une force beaucoup plus faible. L'équilibre entre les deux forces est donc rompu au profit de l'onde 1, de sorte que la force totale est non nulle et dirigée vers les $x > 0$. Les conclusions sont inversées au point d'abscisse $x = x_-$, où la force totale est non nulle et dirigée vers les $x < 0$. Enfin, en $x = 0$, les désaccords des 2 ondes sont égaux et la force totale nulle. On obtient ainsi une force de rappel piégeant les atomes autour de $x = 0$.

e_{+1} , e_0 et e_{-1} , ainsi que du sous-niveau g_0 de l'état fondamental dans un champ magnétique inhomogène B appliqué le long de l'axe Ox . Ce champ est nul en $x = 0$ et varie linéairement avec x au voisinage de $x = 0$; il est par exemple créé par deux bobines circulaires de même axe Ox , parcourues par des courants opposés, et disposées symétriquement par rapport à $x = 0$. On choisit Ox comme axe de quantification, ce qui permet de définir les nombres quantiques magnétique m_e et m_g des sous-niveaux de l'état excité et de l'état fondamental. Les deux ondes 1 et 2 se propageant en sens opposés ont des polarisations circulaires opposées σ_+ et σ_- par rapport à cet axe de quantification⁸. L'onde 1, de polarisation σ_+ , excite la transition $g_0 \leftrightarrow e_{+1}$ alors que l'onde 2, de polarisation σ_- , excite la transition $g_0 \leftrightarrow e_{-1}$. L'énergie $\hbar\omega_0$ de la transition atomique en champ nul est égale à la différence entre

8. On définit généralement les polarisations circulaires droite et gauche d'un photon par rapport à sa direction de propagation. Les polarisations des deux faisceaux 1 et 2 de la Figure 5 sont alors toutes deux circulaires droites (dans les deux cas, le champ électrique de l'onde laser tourne en fonction du temps dans le sens direct autour de la direction de propagation). De façon générale, l'étude des règles de sélection des diverses transitions liées à la conservation du moment cinétique de spin (voir Compléments B_{XIX} et C_{XIX}) se fait plus commodément si l'on définit les nombres quantiques et les polarisations (σ_+) et (σ_-) de tous les faisceaux par rapport à un même axe, comme nous l'avons fait ici en choisissant Ox .

les énergies des états e_0 et g_0 (traits pleins horizontaux de la figure). Le désaccord $\hbar\delta = \hbar\omega - \hbar\omega_0$ entre l'énergie $\hbar\omega$ des photons laser et celle de la transition atomique en champ nul est représenté par la différence entre les ordonnées de l'horizontale en pointillés et de l'horizontale en traits pleins de la figure. On suppose ici que le désaccord est négatif (fréquence des lasers ω décalée vers le rouge de la fréquence atomique ω_0).

Au point d'abscisse $x = 0$, les énergies des états e_{+1} et e_{-1} sont égales de même que les désaccords des ondes 1 et 2 qui excitent les transitions $g_0 \leftrightarrow e_{+1}$ et $g_0 \leftrightarrow e_{-1}$. Les forces de pression de radiation exercées par les 2 ondes sont alors égales et opposées, de sorte que la force totale est nulle. Cet équilibre est rompu quand on s'écarte de $x = 0$. Par exemple, en $x = x_+$, l'onde 1 qui excite la transition $g_0 \rightarrow e_{+1}$, est résonnante avec cette transition et la force qu'elle exerce est maximale. En revanche, en ce point l'onde 2, qui excite la transition $g_0 \rightarrow e_-$, est désaccordée de résonance de sorte qu'elle exerce une force beaucoup plus faible. L'équilibre entre les 2 ondes est donc rompu au profit de l'onde 1 et la force totale exercée par les 2 ondes est alors non nulle et dirigée vers la droite. Les conclusions sont inversées au point d'abscisse $x = x_-$, où la force totale est non nulle et dirigée vers la gauche. On obtient ainsi une force de rappel, proportionnelle à x au voisinage de $x = 0$, qui piège les atomes autour de $x = 0$. Un tel piège est appelé "piège magnéto-optique" ("*magneto-optical trap*" ou *MOT* en anglais).

Pour simplifier la discussion, nous nous sommes limités à un modèle à une dimension, mais l'extension à 3 dimensions est possible. Notons en particulier que le champ créé par 2 bobines circulaires centrées sur l'axe Ox de part et d'autre du point $x = 0$ et parcourues par des courants de sens opposés est nul en $x = 0$ et possède des gradients non nuls le long des axes Oy et Oz . La valeur non nulle du désaccord vers le rouge a en plus l'avantage de donner naissance à un refroidissement Doppler. Le piège magnéto-optique est devenu maintenant un outil de base de la physique des atomes froids⁹.

3. Blocage du recul par un confinement spatial

Nous supposons maintenant que l'atome ou l'ion étudié est soumis à un potentiel extérieur qui le confine dans une région de l'espace. Le spectre d'énergie des variables externes n'est alors plus un spectre continu (comme ce serait le cas pour un atome libre), mais un spectre comportant une partie discrète correspondant aux états liés de l'atome. La présence du potentiel extérieur entraîne également que l'hamiltonien atomique n'est plus invariant par translation spatiale, de sorte que l'impulsion totale n'est plus un bon nombre quantique. Nous nous proposons dans cette section d'étudier comment les spectres d'absorption et d'émission de l'atome sont modifiés par son confinement dans le potentiel, et comment son recul peut être bloqué dans certains cas.

3-a. Hypothèses sur le potentiel extérieur de piégeage

Nous supposerons que le potentiel extérieur n'agit que sur les variables externes, et non sur les variables internes. C'est par exemple le cas d'un ion atomique

9. Pour une description des premières réalisations expérimentales d'un tel piège et pour une étude plus quantitative de ses performances, on pourra consulter le § 14.7 de [23].

piégé par des champs électrique et magnétique qui n'agissent que sur le centre de masse via la charge globale de l'ion, pas sur les variables internes¹⁰. La Figure 6 représente les potentiels de piégeage lorsque l'atome ou l'ion est dans l'état interne a ou dans l'état interne b . Les deux courbes de potentiel sont identiques et se déduisent l'une de l'autre par une translation verticale d'amplitude $\hbar\omega_0$ où ω_0 est la fréquence de la transition atomique interne $b \leftrightarrow a$. Le spectre des niveaux de vibration, d'énergies $E_v, E_{v'}, E_{v''}, \dots$, est le même pour les deux potentiels. Les états atomiques sont repérés par deux nombres quantiques : un nombre quantique a ou b pour les variables internes ; un nombre quantique de vibration v, v', v'', \dots pour les variables externes. Les transitions atomiques entre les deux états internes a et b acquièrent donc une structure due au mouvement de vibration du centre de masse. La fréquence $\omega_{v',v}$ de la transition $b, v' \leftrightarrow a, v$ est donnée par l'équation :

$$\hbar\omega_{v',v} = \hbar\omega_0 + E_{v'} - E_v \tag{54}$$

La quantité $E_{v'} - E_v$ représente la variation d'énergie externe de l'atome au cours de la transition $b, v' \rightarrow a, v$.

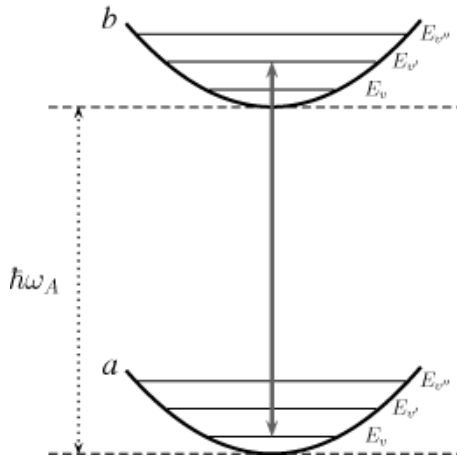


FIGURE 6 – Le potentiel extérieur qui confine l'ion est le même, que l'atome soit dans l'état interne a ou b . Le spectre des niveaux de vibration du centre de masse dans le potentiel extérieur est donc le même pour les deux états internes.

3-b. Intensités des raies vibrationnelles

Nous avons montré dans le § C-5 du Chapitre XIX que les éléments de matrice de l'hamiltonien d'interaction pouvaient être mis sous la forme d'un produit de trois facteurs relatifs aux variables atomiques internes et externes et aux variables de rayonnement – cf. relations (C-34) et (C-35) de ce chapitre. La partie relative aux variables externes est égale à $\langle \psi_{\text{fin}}^{\text{ext}} | \exp(i \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}) | \psi_{\text{in}}^{\text{ext}} \rangle$ pour un processus d'absorption,

10. L'ion est en général confiné au centre du piège, dans une région où les champs électrique et magnétique sont très faibles. Il est alors légitime de négliger les déplacements Stark ou Zeeman des états internes.

où $|\psi_{\text{fin}}^{\text{ext}}\rangle$ et $|\psi_{\text{in}}^{\text{ext}}\rangle$ sont les états externes final et initial de la transition, égaux ici à $|\varphi_{v'}\rangle$ et $|\varphi_v\rangle$. On en déduit que l'intensité de la raie vibrationnelle $a, v \leftrightarrow b, v'$ est proportionnelle à :

$$I_{v',v} = |\langle \varphi_{v'} | \exp(i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}) | \varphi_v \rangle|^2 \quad (55)$$

Les $I_{v',v}$ obéissent à la règle de somme (obtenue grâce à la relation de fermeture sur les états $|\varphi_{v'}\rangle$) :

$$\sum_{v'} I_{v',v} = \sum_{v'} \langle \varphi_v | \exp(-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}) | \varphi_{v'} \rangle \langle \varphi_{v'} | \exp(i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}) | \varphi_v \rangle = 1 \quad (56)$$

Il s'ensuit que le poids relatif de la transition $a, v \rightarrow b, v'$ parmi toutes les transitions partant de a, v est égal précisément à $I_{v',v}$.

Autre règle de somme

Les poids relatifs $I_{v',v}$ satisfont à une autre règle de somme :

$$\langle E \rangle = \sum_{v'} I_{v',v} (E_{v'} - E_v) = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} = E_{\text{rec}} \quad (57)$$

qui exprime que l'énergie moyenne gagnée par un atome passant d'un niveau donné a, v à un autre niveau b, v' est égale à l'énergie de recul, quel que soit v . Pour démontrer (57), ré-écrivons la somme sur v' de (57) sous la forme :

$$\sum_{v'} \langle \varphi_v | \left[\exp(-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}), \hat{H}_{\text{ext}} \right] | \varphi_{v'} \rangle \langle \varphi_{v'} | \exp(i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}) | \varphi_v \rangle \quad (58)$$

où $\hat{H}_{\text{ext}} = \hat{\mathbf{P}}^2/2M + V(\hat{\mathbf{R}})$ est l'hamiltonien des variables externes. Le seul terme de H_{ext} qui ne commute pas avec $\exp(-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}})$ est celui d'énergie cinétique. On peut donc remplacer le commutateur apparaissant dans (58) par $\left[\exp(-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}), \hat{\mathbf{P}}^2/2M \right]$. Développons ce commutateur et utilisons la relation de fermeture sur les états $|\varphi_{v'}\rangle$ ainsi que la relation :

$$\exp(-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}) \left(\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} \right) \exp(+i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}) = \frac{1}{2M} (\hat{\mathbf{P}} + \hbar\mathbf{k})^2 \quad (59)$$

Nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle \varphi_v | \exp(-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}) \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} \exp(+i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}) - \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} | \varphi_v \rangle \\ = E_{\text{rec}} + \langle \varphi_v | \hbar\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{P}} / M | \varphi_v \rangle = E_{\text{rec}} \end{aligned} \quad (60)$$

puisque, compte tenu du théorème d'Ehrenfest (Chapitre III, § D.1.d.β), la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{\mathbf{P}}$ (égal à $M d \langle \mathbf{R} \rangle / dt$) dans l'état stationnaire $|\varphi_v\rangle$ est nulle.

3-c. Influence du confinement sur les spectres d'absorption et d'émission

Le confinement du centre de masse modifie de façon importante les spectres d'absorption et d'émission de l'atome.

Comme nous l'avons vu au § 1, quand l'atome est libre et qu'il a une impulsion initiale bien définie \mathbf{P}_{in} , l'absorption d'un photon d'impulsion $\hbar\mathbf{k}$ le porte dans un état d'impulsion bien définie $\mathbf{P}_{\text{fin}} = \mathbf{P}_{\text{in}} + \hbar\mathbf{k}$. La conservation de l'impulsion globale

entraîne qu'il existe un seul état final, $|b, \mathbf{P}_{\text{fin}}\rangle$, correspondant à un état initial $|a, \mathbf{P}_{\text{in}}\rangle$, et par suite une seule raie d'absorption $a \leftrightarrow b$.

En revanche, quand l'impulsion globale n'est plus conservée à cause du potentiel qui confine l'atome, il apparaît plusieurs raies reliant un état a, v donné à plusieurs états finals b, v' possibles, dont les fréquences $\omega_{v',v}$ sont données par (54). Se pose alors la question de savoir laquelle de toutes ces raies est la plus intense.

Pour y répondre, revenons à l'expression (55) du poids relatif de la transition $a, v \rightarrow b, v'$. Dans cette équation, l'opérateur $\exp(i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}})$ est un opérateur de translation d'une quantité $\hbar\mathbf{k}$ dans l'espace des impulsions. La quantité $I_{v',v}$ est donc proportionnelle au carré du module du produit scalaire de la fonction d'onde vibrationnelle $\varphi_{v'}(\mathbf{r})$ par la fonction d'onde $\varphi_v(\mathbf{r})$ traduite d'une quantité $\hbar\mathbf{k}$ dans l'espace des impulsions. Supposons alors que l'atome soit confiné dans une région spatiale d'extension Δx très petite devant la longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$ du photon incident. La dispersion d'impulsion Δp de la fonction d'onde est alors supérieure à $\hbar k$ puisque la condition :

$$\Delta x \ll \lambda \tag{61}$$

entraîne que :

$$\Delta p \simeq \frac{\hbar}{\Delta x} \gg \frac{\hbar}{\lambda} = \frac{\hbar k}{2\pi} \tag{62}$$

Tant que l'énergie des états excités n'est pas trop grande, la translation dans l'espace des impulsions de la fonction d'onde $\varphi_v(\mathbf{r})$ d'une quantité $\hbar\mathbf{k}$ très petite devant sa largeur ne change donc pratiquement pas cette fonction d'onde, qui par suite reste orthogonale à $\varphi_{v'}(\mathbf{r})$ si $v' \neq v$. La raie la plus intense du spectre d'absorption est donc la raie sans changement du nombre quantique de vibration (raie appelée parfois *raie à zéro phonon*), dont la fréquence ne subit aucun changement et reste égale à ω_0 . Un confinement fort supprime donc effet Doppler et recul de l'atome.

Remarque sur la conservation de l'impulsion

On peut se demander ce qu'il est advenu de l'impulsion du photon qui a été absorbé par l'atome sur la transition à zéro phonon. En fait, nous avons traité ici le potentiel de piégeage de l'atome comme un potentiel extérieur, qui brise l'invariance par translation du problème étudié : l'hamiltonien ne commute alors pas avec l'impulsion totale, qui n'est pas conservée. Il n'est donc pas surprenant qu'il soit alors impossible de suivre ce que devient l'impulsion du photon. Cependant, on peut également décrire le potentiel de piégeage, non pas comme donné de l'extérieur, mais comme provenant de l'interaction de l'atome avec un autre objet physique dont la dynamique est prise en compte. Un traitement quantique de ce dispositif et de son interaction avec l'atome permet alors d'introduire, pour le système global "atome + dispositif de piégeage", un hamiltonien commutant avec l'impulsion totale, et de voir que c'est le système global qui absorbe l'impulsion du photon. Comme cependant cette impulsion reste microscopique, alors que la masse de l'appareillage en question est macroscopique, la vitesse de recul est tellement faible que les déplacements de fréquence qui lui sont associés sont totalement indétectables.

3-d. Cas particulier d'un potentiel harmonique à une dimension

Nous supposons maintenant que le potentiel extérieur qui confine les atomes est harmonique. Soit ω_{osc} la fréquence d'oscillation des atomes dans ce potentiel. Les

énergies E_v des niveaux de vibration sont égales à $(v + 1/2)\hbar\omega_{\text{osc}}$, où v est un entier positif ou nul. La largeur spatiale Δx_0 de la fonction d'onde du niveau fondamental $v = 0$ est égale à $\sqrt{\hbar/2M\omega_{\text{osc}}}$. Pour caractériser le confinement, nous introduirons le paramètre sans dimension¹¹ :

$$\eta = k\Delta x_0 = 2\pi \frac{\Delta x_0}{\lambda} \quad (63)$$

Si $\eta \ll 1$, les atomes sont confinés dans une région petite devant la longueur d'onde du rayonnement. Le carré de η a une signification physique simple, puisque :

$$\eta^2 = \frac{\hbar k^2}{2M\omega_{\text{osc}}} = \frac{E_{\text{rec}}}{\hbar\omega_{\text{osc}}} \quad (64)$$

est le rapport entre l'énergie de recul E_{rec} et $\hbar\omega_{\text{osc}}$, qui est la différence entre énergies de vibration dans les puits.

Il est intéressant de calculer, en fonction de η , les intensités $I_{0,0}$ et $I_{0,1}$ des raies de vibration $a, 0 \rightarrow b, 0$ et $a, 0 \rightarrow b, 1$. Supposons le vecteur d'onde du photon \mathbf{k} parallèle à l'axe x . L'exponentielle $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$ figurant dans l'équation (55) peut être remplacée par $\exp(ik\hat{X})$. Utilisons l'expression de l'opérateur \hat{X} en fonction des opérateurs d'annihilation et de création de l'oscillateur harmonique associé au potentiel extérieur :

$$\hat{X} = \sqrt{\hbar/2M\omega_{\text{osc}}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) = \Delta x_0 (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad (65)$$

On obtient alors à la limite $\eta \ll 1$, compte tenu de (63) :

$$\begin{aligned} \exp(ik\hat{X}) &= \exp[i\eta(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)] \\ &= 1 + i\eta(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) - \frac{\eta^2}{2}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 + \dots \end{aligned} \quad (66)$$

Le développement (66) reporté dans (55) donne, à l'ordre 2 en η :

$$I_{0,0} = 1 - \eta^2 \quad (67a)$$

$$I_{0,1} = \eta^2 \quad (67b)$$

Toutes les autres transitions $a, 0 \rightarrow b, n$ avec $n > 2$ ont des intensités relatives d'ordre supérieur, en η^n . La transition sans changement d'état de vibration, et donc sans recul, est prédominante quand le confinement est important. La transition $a, 0 \rightarrow b, 1$ est beaucoup moins probable, par un facteur $E_{\text{rec}}/\hbar\omega_{\text{osc}}$; quand elle se produit, elle augmente l'énergie de l'atome d'une quantité $\hbar\omega_{\text{osc}}$ beaucoup plus grande que E_{rec} . La règle de somme (57) indique que, en moyenne, l'énergie gagnée par l'atome reste égale à E_{rec} .

3-e. Effet Mössbauer

En 1958, Rudolf Mössbauer observa des raies très étroites dans le spectre d'absorption résonnante de rayons γ par les noyaux d'atomes dans un cristal. Reprenant

11. Ce paramètre est souvent appelé *paramètre de Lamb-Dicke*, du nom des physiciens qui ont les premiers introduit l'idée d'absorption sans recul à cause du confinement. Pour un survol historique des travaux sur la suppression du recul par confinement, le lecteur intéressé par ces questions pourra consulter le § 6.4.4 de [23] ainsi que les références citées dans ce §.

les travaux antérieurs de Lamb [24] sur la suppression du recul pour l'absorption résonnante de neutrons lents (et non de photons) par les noyaux d'atomes d'un réseau cristallin, il attribua les structures étroites qu'il observait à une suppression du recul. Cette suppression se produit si, dans le spectre des phonons du cristal, il existe des fréquences supérieures à la fréquence de recul $\omega_R = E_{\text{rec}}/\hbar$. L'intérêt de l'effet Mössbauer réside dans la valeur élevée de la fréquence de la transition interne γ , qui peut atteindre plus de 10^{18} Hz. Si la largeur Doppler et le déplacement de recul sont supprimés par le confinement et si la largeur naturelle demeure de l'ordre de 10^6 à 10^7 Hz, comme pour une transition optique, le facteur de qualité de la transition γ peut atteindre des valeurs de l'ordre de 10^{12} . Une telle résolution a permis dès 1959, et pour la première fois en laboratoire, de mesurer le déplacement gravitationnel prévu par la relativité générale entre les fréquences d'un émetteur et d'un récepteur situés dans le champ de gravitation terrestre à des altitudes différant d'une vingtaine de mètres.

4. Suppression du recul dans certains processus multiphotoniques

Dans ce qui précède, nous n'avons considéré que des processus à un photon. Nous verrons dans le Chapitre XX qu'il existe aussi des processus multiphotoniques, au cours desquels l'atome passe d'un état interne a à un autre état b en absorbant ou en émettant plusieurs photons. Durant de tels processus, l'énergie totale et l'impulsion totale sont bien sûr conservées¹².

Considérons alors un processus à deux photons où les deux photons ont la même fréquence ω et des vecteurs d'onde opposés $+\mathbf{k}$ et $-\mathbf{k}$. L'impulsion totale du rayonnement est dans ce cas nulle. Si l'atome absorbe ces deux photons, son impulsion ne change pas. Son énergie externe n'est donc pas modifiée, de sorte qu'il n'y a plus d'effet Doppler ni d'énergie de recul. Cette possibilité peut être étendue à des processus à p photons si la somme des vecteurs d'onde des p photons est nulle :

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \dots + \mathbf{k}_p = \mathbf{0} \tag{68}$$

Cette idée a été proposée indépendamment par deux groupes, en Russie [25] et en France [26]. Elle a permis des avancées expérimentales significatives en spectroscopie de haute résolution où la largeur des raies n'est plus limitée par la largeur Doppler, mais par la largeur naturelle qui est souvent beaucoup plus faible. Un exemple particulièrement intéressant d'application est l'étude de la transition $1s \leftrightarrow 2s$ de l'atome d'hydrogène par spectroscopie à deux photons sans effet Doppler [27]. L'intérêt de cette transition est que l'état supérieur $2s$ de la transition est métastable et de longue durée de vie (environ 120 ms). Sa largeur naturelle est donc très petite et la raie à deux photons très fine, ce qui permet des mesures extrêmement précises de constantes fondamentales comme la constante de Rydberg. Il faut cependant noter que l'interaction avec les rayonnements laser qui induisent la transition à deux photons s'accompagne de déplacements de niveaux d'énergie¹³, proportionnels à l'intensité lumineuse ; il faut en tenir compte de manière précise pour déterminer la valeur non perturbée de la fréquence de la transition à deux photons.

12. Nous considérons ici à nouveau des atomes libres, sans potentiel extérieur.

13. Voir le Complément B_{XX}, § 2-b

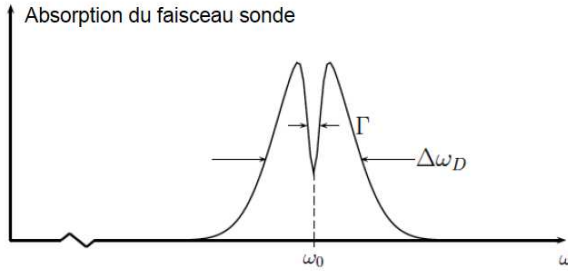


FIGURE 7 – *Spectroscopie d’absorption saturée.* La figure représente le profil d’absorption du faisceau sonde quand on balaie la fréquence ω des deux faisceaux laser. Un creux étroit, de largeur Γ , apparaît au centre d’un profil Doppler beaucoup plus large, de largeur $\Delta\omega_D$.

Spectroscopie par absorption saturée sans effet Doppler

Des effets non linéaires apparaissent aussi dans des configurations expérimentales où l’atome interagit avec deux faisceaux lumineux de même fréquence ω et se propageant dans des sens opposés, un faisceau intense appelé faisceau pompe et un faisceau de faible intensité, appelé faisceau sonde. A la différence des transitions à deux photons considérées dans le § précédent, on suppose ici que les transitions induites par chacun des deux faisceaux sont des transitions à un photon reliant les deux états internes a et b de la transition atomique ; ω est donc proche de la fréquence ω_0 de la transition atomique (et non de $\omega_0/2$).

Nous négligerons ici l’énergie de recul, très faible en général dans le domaine optique devant la largeur naturelle Γ de l’état supérieur b . En revanche, les déplacements Doppler des raies d’absorption des divers atomes jouent un rôle important, car ils sont différents pour le faisceau pompe et le faisceau sonde du fait de leurs directions de propagation opposées. Le faisceau pompe interagit avec un atome de vitesse v_P si sa fréquence apparente $\omega - kv_P$ pour cet atome coïncide avec la fréquence ω_0 de la transition atomique à Γ près, c’est-à-dire si $kv_P = \omega - \omega_0$ à Γ près. De même, le faisceau sonde interagit avec les atomes de vitesse v_S si $\omega + kv_S = \omega_0$ à Γ près, c’est-à-dire si $kv_S = -(\omega - \omega_0)$ à Γ près. Si ω est différent de ω_0 , on a $v_P \neq v_S$: les deux faisceaux n’interagissent pas avec les mêmes atomes de la distribution de vitesses, de sorte que l’absorption du faisceau sonde n’est pas perturbée par la présence du faisceau pompe. Mais cette perturbation devient importante lorsque $\omega = \omega_0$ (à Γ près), puisque les deux faisceaux interagissent alors avec le même sous-ensemble d’atomes (ceux appartenant à une même “classe de vitesses” selon l’axe des faisceaux lumineux).

Le faisceau pompe intense diminue la différence de population entre les deux niveaux a et b de la transition atomique, tendant à égaliser ces populations ; l’absorption du faisceau sonde est donc diminuée quand les deux faisceaux interagissent avec la même classe de vitesse, c’est-à-dire au voisinage de $\omega = \omega_0$. Quand on balaie la fréquence ω des deux faisceaux laser, l’absorption du faisceau sonde varie suivant un profil Doppler centré autour de ω_0 , de largeur $\Delta\omega_D$, au centre duquel (Figure 7) apparaît un creux de largeur beaucoup plus faible Γ . Cette méthode appelée *absorption saturée* permet de déterminer la fréquence atomique ω_0 avec une résolution bien meilleure que si l’on utilisait un seul faisceau.

Conclusion

Dans ce complément, nous avons montré comment l'analyse des échanges d'impulsion entre atomes et photons permet d'introduire et d'interpréter plusieurs effets physiques importants comme la largeur Doppler, l'énergie de recul, les forces de pression de radiation, le ralentissement et le refroidissement laser Doppler des atomes, l'élimination de l'effet Doppler par confinement ou dans des transitions à 2 photons, l'effet Mössbauer.

Ces diverses méthodes ont tout d'abord permis d'améliorer de manière spectaculaire la résolution des mesures spectroscopiques. Elles ont ainsi été très utiles, à la fois pour les mesures de haute précision et pour l'amélioration des horloges atomiques. Ces dernières atteignent maintenant des stabilités relatives de l'ordre de 10^{-16} . En plaçant une telle horloge dans la station spatiale internationale et en comparant sa fréquence à celle d'une horloge similaire restée au sol, on peut espérer tester la valeur du déplacement gravitationnel prévu par la relativité générale avec une précision près de 100 fois supérieure à celle de tous les autres tests. Une autre conclusion qui se dégage de ces études est que les interactions atomes-photons apparaissent aussi comme un outil pour contrôler et manipuler les atomes.

Nous verrons également dans le Complément C_{XIX} comment les échanges de moment cinétique entre atomes et photons permettent de contrôler le moment cinétique des atomes en les polarisant par pompage optique. De telles manipulations ont permis d'ouvrir des domaines de recherche nouveaux, comme l'interférométrie atomique ou les gaz quantiques dégénérés.

Complément B_{XIX}

Moment cinétique du rayonnement

1	Valeur moyenne du moment cinétique pour une particule de spin 1	474
1-a	Fonction d'onde, opérateur de spin	474
1-b	Valeur moyenne du moment cinétique de spin	475
1-c	Valeur moyenne du moment cinétique orbital	476
2	Moment cinétique du rayonnement libre classique en fonction des variables normales	477
2-a	Calcul dans l'espace des positions	477
2-b	Passage dans l'espace réciproque	478
2-c	Différence entre les moments cinétiques d'une particule matérielle et du rayonnement	480
3	Discussion physique	480
3-a	Moment cinétique de spin du rayonnement	480
3-b	Mise en évidence expérimentale du moment cinétique de spin du rayonnement	482
3-c	Moment cinétique orbital du rayonnement	482

Introduction

Le moment cinétique du rayonnement joue un rôle important dans diverses situations, en particulier dans les expériences de physique atomique. Comme nous le verrons dans le Complément C_{XIX}, les échanges de moment cinétique entre atomes et photons sont à la base de méthodes expérimentales, comme le pompage optique, qui constituent l'un des premiers exemples de manipulation d'atomes par la lumière.

Dans le Chapitre XVIII, une transformation de Fourier spatiale des champs classiques nous a conduits à introduire les variables normales $\alpha_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{k})$ et $\alpha_{\boldsymbol{\varepsilon}}^*(\mathbf{k})$ du champ, qui sont les composantes des champs dans une base d'ondes planes transverses. Lors de la quantification, ces variables normales deviennent les opérateurs d'annihilation $\hat{a}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{k})$ et de création $\hat{a}_{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\dagger}(\mathbf{k})$ d'un photon dans le mode $\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}$. Une telle base d'ondes planes est particulièrement commode pour l'étude de l'énergie et de l'impulsion du rayonnement, car les photons du mode $\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}$ ont une énergie $\hbar\omega = \hbar c k$ et une impulsion $\hbar\mathbf{k}$ bien définies. En revanche, le développement du moment cinétique du champ en variables normales $\alpha_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{k})$ et $\alpha_{\boldsymbol{\varepsilon}}^*(\mathbf{k})$ n'est pas aussi simple car les photons du mode $\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}$ n'ont pas un moment cinétique bien déterminé. Le but de ce complément est d'établir l'expression d'un développement qui soit mieux adapté à l'étude du moment cinétique du rayonnement, et d'en déduire un certain nombre de résultats qui en découlent.

Dans la description classique du rayonnement, la variable normale $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) = \sum_{\boldsymbol{\varepsilon}} \alpha_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{k})\boldsymbol{\varepsilon}$ est une fonction vectorielle de \mathbf{k} qui présente une certaine analogie avec

une fonction d'onde dans l'espace réciproque, qui serait alors celle du photon (dans l'espace de ses impulsions). Une grandeur physique, comme l'énergie totale ou l'impulsion totale du rayonnement, apparaît en effet comme la valeur moyenne dans cette fonction d'onde d'un opérateur à une particule représentant l'énergie ou l'impulsion d'un photon. Comme cette fonction d'onde est vectorielle, elle peut être assimilée à la fonction d'onde d'une particule de spin 1 dont le moment cinétique total \mathbf{J} serait la somme du moment cinétique orbital \mathbf{L} et du moment cinétique de spin \mathbf{S} . Nous commençons donc, dans le § 1, par calculer en mécanique quantique la valeur moyenne, dans l'état d'une particule de spin 1 décrit par la fonction d'onde vectorielle $\Psi(\mathbf{k})$, des moments cinétique orbital et de spin de cette particule. Revenant à la physique classique nous calculons ensuite, dans le § 2, l'expression du moment cinétique total \mathbf{J}_R du rayonnement libre ; nous l'écrivons en fonction, tout d'abord des champs dans l'espace réciproque, puis des variables normales $\alpha(\mathbf{k})$ de ce champ. Nous constaterons alors que l'expression ainsi obtenue a effectivement la même forme que celle du § 1, moyennant le remplacement de $\Psi(\mathbf{k})$ par $\alpha(\mathbf{k})$. Ceci nous permettra d'obtenir le développement en variables normales, non seulement du moment cinétique total du champ, mais aussi du moment cinétique orbital et du moment cinétique de spin de ce champ. L'interprétation physique de ces résultats est discutée dans le § 3, qui souligne en particulier quelques caractéristiques importantes de ces deux types de moment cinétique.

1. Valeur moyenne du moment cinétique pour une particule de spin 1

Nous commençons par étudier une particule massive de spin 1, qui n'est donc pas un photon. Les résultats nous seront utiles comme point de comparaison lors des calculs du paragraphe suivant, où nous revenons au champ électromagnétique.

1-a. Fonction d'onde, opérateur de spin

Les conclusions de ce § 1 seront comparées avec celles du § 2 suivant concernant le moment cinétique du rayonnement exprimé en termes de variables normales. Comme les variables normales caractérisent le champ dans l'espace réciproque, il est important ici de décrire l'état de la particule de spin 1 dans ce même espace. Le vecteur d'état de la particule peut être développé sur une base $\{|\mathbf{k}, \nu\rangle\}$, où \mathbf{k} désigne le vecteur d'onde et ν l'état de spin :

$$|\Psi\rangle = \sum_{\nu} \int d^3k \psi_{\nu}(\mathbf{k}) |\mathbf{k}, \nu\rangle \quad (1)$$

avec :

$$\psi_{\nu}(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k}, \nu | \Psi \rangle \quad (2)$$

En général, on prend pour les états $|\nu\rangle$ les états propres $|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle$ de la composante S_z du spin. Nous choisirons ici une autre base :

$$\begin{aligned} |x\rangle &= (1/\sqrt{2}) [|-1\rangle - |+1\rangle] \\ |y\rangle &= (i/\sqrt{2}) [|-1\rangle + |+1\rangle] \\ |z\rangle &= |0\rangle \end{aligned} \quad (3)$$

L'effet des composantes S_x, S_y, S_z de \mathbf{S} sur ces vecteurs de base s'obtient aisément. Il suffit d'inverser les équations (3), d'utiliser $S_x = (S_+ + S_-)/2$, $S_y = -i(S_+ - S_-)/2$, ainsi que l'action de S_+, S_-, S_z sur les états $|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle$, pour obtenir par exemple :

$$\begin{aligned} S_x|x\rangle &= \frac{1}{2}(S_+ + S_-)\frac{1}{\sqrt{2}}[|-1\rangle - |+1\rangle] = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}}[\sqrt{2}|0\rangle - \sqrt{2}|0\rangle] = 0 \\ S_x|y\rangle &= \frac{i}{2}(S_+ + S_-)\frac{1}{\sqrt{2}}[|-1\rangle + |+1\rangle] = \frac{i\hbar}{2\sqrt{2}}[\sqrt{2}|0\rangle + \sqrt{2}|0\rangle] = i\hbar|z\rangle \\ S_x|z\rangle &= \frac{1}{2}(S_+ + S_-)|0\rangle = \frac{\hbar}{2}[\sqrt{2}|+1\rangle + \sqrt{2}|-1\rangle] = -i\hbar|y\rangle \end{aligned} \quad (4)$$

Ces équations, ainsi que les équations similaires pour l'action de S_y et S_z , peuvent s'écrire de manière plus compacte sous la forme :

$$S_a|b\rangle = i\hbar \sum_c \varepsilon_{abc} |c\rangle \quad (5)$$

où a, b, c sont les indices x, y, z et ε_{abc} le tenseur complètement antisymétrique à trois dimensions¹. L'équation (5) entraîne aussi que :

$$\langle c|S_a|b\rangle = i\hbar \varepsilon_{abc} \quad (6)$$

1-b. Valeur moyenne du moment cinétique de spin

La valeur moyenne de S_a s'écrit, compte tenu de (1) :

$$\langle \Psi | S_a | \Psi \rangle = \int d^3k \int d^3k' \sum_{b,c} \psi_c^*(\mathbf{k}') \langle \mathbf{k}', c | S_a | \mathbf{k}, b \rangle \psi_b(\mathbf{k}) \quad (7)$$

Comme S_a n'agit pas sur les degrés de liberté orbitaux décrits par la variable \mathbf{k} on a, compte tenu de (6) :

$$\langle \mathbf{k}', c | S_a | \mathbf{k}, b \rangle = i\hbar \varepsilon_{abc} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (8)$$

Le report de ce résultat dans (7) donne alors :

$$\langle \Psi | S_a | \Psi \rangle = i\hbar \int d^3k \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} \psi_c^*(\mathbf{k}) \psi_b(\mathbf{k}) = -i\hbar \int d^3k \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} \psi_b^*(\mathbf{k}) \psi_c(\mathbf{k}) \quad (9)$$

(nous avons utilisé l'antisymétrie des ε_{abc}). Comme la composante a du produit vectoriel de deux vecteurs \mathbf{V} et \mathbf{W} s'écrit :

$$(\mathbf{V} \times \mathbf{W})_a = \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} V_b W_c \quad (10)$$

nous obtenons :

$$\langle \Psi | S_a | \Psi \rangle = -i\hbar \int d^3k (\Psi^* \times \Psi)_a \quad (11)$$

1. On définit $\varepsilon_{abc} = +1$ si abc sont xyz ou se déduisent de xyz par une permutation paire ; $\varepsilon_{abc} = -1$ si abc se déduit de xyz par une permutation impaire ; enfin $\varepsilon_{abc} = +0$ si deux de trois indices abc (ou les trois) sont égaux.

1-c. Valeur moyenne du moment cinétique orbital

Le moment cinétique orbital s'écrit :

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (12)$$

Sa composante L_a agit dans l'espace des positions selon :

$$L_a = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_a \Rightarrow \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} r_b p_c = -i\hbar \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} r_b \partial_c \quad \text{avec} \quad \partial_c = \partial/\partial r_c \quad (13)$$

Passer dans l'espace réciproque revient à faire une transformée de Fourier spatiale. Les opérateurs multiplication par r_b et dérivation par rapport à r_c dans l'espace des \mathbf{r} deviennent respectivement, dans l'espace des \mathbf{k} , les opérateurs dérivation par rapport à k_b et multiplication par k_c (à un facteur de proportionnalité près) :

$$r_b \underset{\text{TF}}{\leftrightarrow} i\partial/\partial k_b = i\tilde{\partial}_b \quad \partial/\partial r_c = \partial_c \underset{\text{TF}}{\leftrightarrow} ik_c \quad (14)$$

avec la notation :

$$\tilde{\partial}_b \equiv \partial/\partial k_b \quad (15)$$

L'action dans l'espace réciproque de la composante L_a du moment cinétique orbital est donc :

$$\begin{aligned} L_a &\Rightarrow -i\hbar \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} (i\tilde{\partial}_b) (ik_c) = i\hbar \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} k_c \tilde{\partial}_b \\ &= -i\hbar \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} k_b \tilde{\partial}_c \end{aligned} \quad (16)$$

Dans la dernière égalité de la première ligne nous avons fait passer $\tilde{\partial}_b$ à droite de k_c , ce qui est possible puisque la présence de ε_{abc} entraîne la nullité de tous les termes où les indices b et c sont égaux. Pour obtenir l'égalité de la seconde ligne de (16), nous avons remplacé b par c et c par b dans le dernier terme de la première ligne et utilisé à nouveau $\varepsilon_{acb} = -\varepsilon_{abc}$.

Calculons enfin la valeur moyenne de L_a dans l'état Ψ . Compte tenu de (1), il vient :

$$\langle \Psi | L_a | \Psi \rangle = \int d^3k \int d^3k' \sum_{d,e} \psi_d^*(\mathbf{k}') \langle \mathbf{k}', d | L_a | \mathbf{k}, e \rangle \psi_e(\mathbf{k}) \quad (17)$$

Comme L_a n'agit pas sur les degrés de liberté de spin, on a forcément $d = e$ dans l'élément de matrice du second membre, ce qui donne, en utilisant la forme différentielle (16) de L_a :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | L_a | \Psi \rangle &= \int d^3k \int d^3k' \sum_d \psi_d^*(\mathbf{k}') \langle \mathbf{k}', d | L_a | \mathbf{k}, d \rangle \psi_d(\mathbf{k}) \\ &= -i\hbar \int d^3k \sum_{b,c,d} \psi_d^*(\mathbf{k}) \varepsilon_{abc} k_b \tilde{\partial}_c \psi_d(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (18)$$

Finalement, en ajoutant (9) et (18), on obtient l'expression suivante pour la valeur moyenne du moment cinétique total de la particule dans l'état Ψ :

$$\langle \Psi | J_a | \Psi \rangle = -i\hbar \int d^3k \sum_{b,c,d} \left[\underbrace{\psi_b^*(\mathbf{k}) \varepsilon_{abc} \psi_c(\mathbf{k})}_{\text{spin}} + \underbrace{\psi_d^*(\mathbf{k}) \varepsilon_{abc} k_b \tilde{\partial}_c \psi_d(\mathbf{k})}_{\text{orbital}} \right] \quad (19)$$

2. Moment cinétique du rayonnement libre classique en fonction des variables normales

Montrons maintenant que le calcul du moment cinétique du rayonnement présente une certaine analogie avec celui du § 1.

2-a. Calcul dans l'espace des positions

La relation (A-52) du Chapitre XVIII indique que le moment cinétique total du rayonnement libre (en l'absence de particules) s'écrit :

$$\mathbf{J} = \epsilon_0 \int d^3r \left[\mathbf{r} \times [\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r})] \right] \quad (20)$$

Remplaçons \mathbf{B} par $\nabla \times \mathbf{A}$ et utilisons l'identité $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \mathbf{b} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{c}$ relative au double produit vectoriel. On obtient, en n'oubliant pas de respecter l'ordre entre ∇ et \mathbf{A} :

$$\mathbf{E} \times [\nabla \times \mathbf{A}] = \sum_d E_d \nabla A_d - (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{A} \quad (21)$$

où E_d est la composante de $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r})$ sur l'axe Ox , Oy ou Oz repéré par l'indice d . Le report de (21) dans (20) conduit à :

$$\mathbf{J} = \epsilon_0 \int d^3r \left\{ \sum_d E_d (\mathbf{r} \times \nabla) A_d - \mathbf{r} \times (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{A} \right\} \quad (22)$$

Considérons tout d'abord la contribution $J^{(1)}$ du second terme de (22). Sa composante $J_a^{(1)}$ s'écrit :

$$\begin{aligned} J_a^{(1)} &= -\epsilon_0 \int d^3r \left\{ \mathbf{r} \times (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{A} \right\}_a \\ &= -\epsilon_0 \int d^3r \sum_{b,c,d} \varepsilon_{abc} r_b E_d \partial_d A_c \end{aligned} \quad (23)$$

Faisons passer r_b à droite de ∂_d en utilisant :

$$r_b \partial_d = \partial_d r_b - \delta_{bd} \quad (24)$$

La contribution du terme $-\delta_{bd}$ à (23) donne :

$$\epsilon_0 \int d^3r \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} E_b A_c = \epsilon_0 \int d^3r (\mathbf{E} \times \mathbf{A})_a \quad (25)$$

Dans la contribution du terme $\partial_d r_b$ à (23), effectuons une intégration par parties. La contribution du terme tout intégré donne une intégrale de surface nulle si les champs décroissent suffisamment vite à l'infini. On obtient ainsi pour la contribution du terme $\partial_d r_b$ à (23) :

$$-\epsilon_0 \int d^3r \sum_{b,c,d} \varepsilon_{abc} E_d \partial_d r_b A_c = 0 + \epsilon_0 \int d^3r \sum_{b,c,d} \varepsilon_{abc} r_b A_c \partial_d E_d \quad (26)$$

On voit apparaître dans le dernier terme de (26) la quantité

$$\sum_d \partial_d E_d = \nabla \cdot \mathbf{E} \quad (27)$$

qui est égale à zéro puisque le champ électrique en l'absence de sources est purement transverse (de divergence nulle). Ce terme disparaît donc.

Finalement, la valeur moyenne de \mathbf{J} est la somme de (25) et du premier terme de (22) :

$$\mathbf{J} = \epsilon_0 \int d^3r \left\{ \underbrace{\mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{A}(\mathbf{r})}_{\text{spin}} + \sum_d \underbrace{E_d(\mathbf{r})(\mathbf{r} \times \nabla) A_d(\mathbf{r})}_{\text{orbital}} \right\} \quad (28)$$

2-b. Passage dans l'espace réciproque

L'expression (28) de \mathbf{J} peut être ré-écrite en fonction des transformées de Fourier des champs $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. En utilisant l'égalité de Parseval-Plancherel et les relations (14), on obtient :

$$\mathbf{J} = \epsilon_0 \int d^3k \left\{ \underbrace{\tilde{\mathbf{E}}^*(\mathbf{k}) \times \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k})}_{\text{spin}} + \sum_d \underbrace{\tilde{E}_d^*(\mathbf{k})(\mathbf{k} \times \tilde{\nabla}) \tilde{A}_d(\mathbf{k})}_{\text{orbital}} \right\} \quad (29)$$

où $\tilde{\nabla}$ représente le gradient par rapport à \mathbf{k} .

Il suffit maintenant d'utiliser les expressions (B-22a) et (B-22b) du Chapitre XVIII pour obtenir les champs $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k})$ et $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k})$ en fonction des variables normales :

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}) = \frac{i\omega}{2\mathcal{N}(k)} [\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) - \boldsymbol{\alpha}^*(-\mathbf{k})] \quad (30a)$$

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\mathcal{N}(k)} [\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}) + \boldsymbol{\alpha}^*(-\mathbf{k})] \quad (30b)$$

où $\mathcal{N}(k)$ a été défini par la relation (A-3) du Chapitre XIX :

$$\mathcal{N}(k) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \omega}{2\hbar}} \quad (31)$$

En reportant (30) dans (29), on obtient :

$$\begin{aligned} J_a = & -i \frac{\hbar}{2} \int d^3k \sum_{b,c,d} \left\{ [\alpha_b^*(\mathbf{k}) - \alpha_b(-\mathbf{k})] \varepsilon_{abc} [\alpha_c(\mathbf{k}) + \alpha_c^*(-\mathbf{k})] \right. \\ & \left. + [\alpha_d^*(\mathbf{k}) - \alpha_d(-\mathbf{k})] \varepsilon_{abc} k_b \tilde{\partial}_c [\alpha_d(\mathbf{k}) + \alpha_d^*(-\mathbf{k})] \right\} \quad (32) \end{aligned}$$

Chacune des deux lignes de (32) contient quatre termes : deux termes où figurent, dans l'un deux fois α^* et dans l'autre deux fois α – on montre ci-dessous qu'ils sont nuls ; deux termes contenant une fois α^* et une fois α – on montre ci-dessous qu'ils sont égaux. On obtient ainsi finalement :

$$J_a = -i\hbar \int d^3k \sum_{b,c,d} \left[\underbrace{\alpha_b^*(\mathbf{k}) \varepsilon_{abc} \alpha_c(\mathbf{k})}_{\text{spin}} + \underbrace{\alpha_d^*(\mathbf{k}) \varepsilon_{abc} k_b \tilde{\partial}_c \alpha_d(\mathbf{k})}_{\text{orbital}} \right] \quad (33)$$

Cette expression a la même forme que (19) : le moment cinétique est la somme d'un terme de spin et d'un terme orbital faisant intervenir les dérivées spatiales. Un tel résultat confirme que la variable normale $\alpha(\mathbf{k})$ peut être assimilée à la fonction d'onde dans l'espace réciproque du photon qui est bien une particule de spin 1. Il donne aussi les expressions explicites du moment cinétique de spin du rayonnement (premier terme du crochet de (33)) et du moment cinétique orbital (second terme).

Pour une particule matérielle on sait (Chapitre VI § D.1.a) qu'en coordonnées sphériques (ou cylindriques) l'effet de la composante selon Oz du moment cinétique correspond à une dérivation par rapport à l'angle azimutal φ :

$$-i\hbar(k_x \tilde{\partial}_y - k_y \tilde{\partial}_x) \Rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (34)$$

Ce résultat découle simplement d'un calcul de dérivées partielles, qui est indépendant de la nature du système physique étudié ; il s'applique donc également à un champ.

Calcul des divers termes apparaissant dans l'équation (32)

Considérons les termes faisant intervenir, dans la première ligne de (32), un produit de deux α^* ou de deux α , par exemple :

$$-i(\hbar/2) \int d^3k \sum_{b,c} [\alpha_b^*(\mathbf{k}) \varepsilon_{abc} \alpha_c^*(-\mathbf{k})] \quad (35)$$

En changeant \mathbf{k} en $-\mathbf{k}$, en intervertissant les indices b et c et en utilisant $\varepsilon_{acb} = -\varepsilon_{abc}$, on montre que (35) est égal à son opposé et donc nul. La même démarche appliquée au terme :

$$+i(\hbar/2) \int d^3k \sum_{b,c} [\alpha_b(-\mathbf{k}) \varepsilon_{abc} \alpha_c^*(-\mathbf{k})] \quad (36)$$

montre que ce terme est égal à :

$$-i(\hbar/2) \int d^3k \sum_{b,c} [\alpha_c(\mathbf{k}) \varepsilon_{abc} \alpha_b^*(\mathbf{k})] \quad (37)$$

qui est égal à l'autre terme de la première ligne de (32) contenant un α^* et un α , si l'on change l'ordre relatif dans lequel apparaissent $\alpha_b^*(\mathbf{k})$ et $\alpha_c(\mathbf{k})$. Dans la théorie classique présentée ici, ces quantités sont des nombres qui commutent, et leur ordre n'a effectivement pas d'importance. Mais il peut être utile de conserver cet ordre pour obtenir une expression qui reste valable lorsque, dans la quantification de la théorie, les α^* et α seront remplacés par les opérateurs de création et d'annihilation qui ne commutent pas.

Le calcul précédent peut être étendu aux termes de la seconde ligne de (32). En plus du changement de \mathbf{k} en $-\mathbf{k}$, il faut effectuer une intégration par parties.

Le terme tout intégré, qui peut être transformé en une intégrale de surface, est nul si les champs tendent suffisamment vite vers zéro à l'infini ; il s'y ajoute une contribution qui montre que les termes contenant deux α^* ou deux α sont égaux à leurs opposés, et donc nuls. En revanche, l'intégration par parties montre que les deux termes contenant un α^* et un α sont égaux si l'ordre des α^* et α peut être inversé. Dans le cas où l'on ne tient pas compte de l'ordre des α^* et α , on obtient ainsi l'expression (33).

2-c. Différence entre les moments cinétiques d'une particule matérielle et du rayonnement

L'analogie étroite qui existe entre les équations (19) et (33) ne doit pas cependant faire oublier une différence importante entre les deux moments cinétiques, qui provient du fait que les variables normales $\alpha(\mathbf{k})$ sont transverses. L'équation de Maxwell $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ du champ libre entraîne en effet que $\alpha(\mathbf{k})$ est perpendiculaire au vecteur d'onde \mathbf{k} en tout point :

$$\mathbf{k} \cdot \alpha(\mathbf{k}) = 0 \quad \forall \mathbf{k} \quad (38)$$

ce qui n'est pas nécessairement le cas pour la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{k})$ d'une particule matérielle dans l'espace réciproque.

3. Discussion physique

3-a. Moment cinétique de spin du rayonnement

Le moment cinétique de spin est le premier terme du second membre de (33), qui peut s'écrire :

$$(S_R)_a = -i\hbar \int d^3k \sum_{b,c} \alpha_b^*(\mathbf{k}) \varepsilon_{b,c} \alpha_c(\mathbf{k}) = -i\hbar \int d^3k [\alpha^*(\mathbf{k}) \times \alpha(\mathbf{k})]_a \quad (39)$$

Pour faire apparaître plus clairement la conséquence de la condition de transversalité (38) sur le moment cinétique de spin du rayonnement, on peut repérer les composantes de $\alpha^*(\mathbf{k})$ et $\alpha(\mathbf{k})$ sur une base différente : au lieu des trois vecteurs e_x, e_y, e_z indépendants de l'orientation du vecteur d'onde \mathbf{k} , on choisit une base de trois vecteurs $e_1(\mathbf{k}), e_2(\mathbf{k}), e_3(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}/k$, incluant le vecteur unité $\boldsymbol{\kappa}$ le long de \mathbf{k} et deux autres vecteurs $e_1(\mathbf{k})$ et $e_2(\mathbf{k})$. Ces trois vecteurs $e_1(\mathbf{k}), e_2(\mathbf{k})$ et $\boldsymbol{\kappa}$ sont orthogonaux entre eux et orthogonaux à $\boldsymbol{\kappa}$; ils forment un trièdre trirectangle direct. Comme les variables normales $\alpha^*(\mathbf{k})$ et $\alpha(\mathbf{k})$ sont transverses, leurs composantes sur $\boldsymbol{\kappa}$ sont nulles. Introduisons en plus les deux combinaisons linéaires complexes² suivantes de $e_1(\mathbf{k})$ et $e_2(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned} e_+(\mathbf{k}) &= -[e_1(\mathbf{k}) + ie_2(\mathbf{k})]/\sqrt{2} \\ e_-(\mathbf{k}) &= +[e_1(\mathbf{k}) - ie_2(\mathbf{k})]/\sqrt{2} \end{aligned} \quad (40)$$

2. L'utilisation de polarisations complexes conduit à modifier les expressions des champs obtenues dans les relations (B-28) à (B-30) du Chapitre XVIII : pour les champs classiques, les termes en $\alpha(\mathbf{k})$ ne sont pas modifiés, mais il faut remplacer le vecteur polarisation par son complexe conjugué dans ceux en $\alpha^*(\mathbf{k})$. Pour les opérateurs de champ quantiques, de façon similaire il faut remplacer le vecteur polarisation par son complexe conjugué dans tous les termes contenant des opérateurs de création $\hat{a}_\epsilon^\dagger(\mathbf{k})$.

correspondant aux deux polarisations circulaires droite et gauche par rapport à la direction de \mathbf{k} . Les variables normales transverses $\alpha^*(\mathbf{k})$ et $\alpha(\mathbf{k})$ peuvent se développer sur ces deux vecteurs :

$$\begin{aligned}\alpha(\mathbf{k}) &= \alpha_+(\mathbf{k})e_+(\mathbf{k}) + \alpha_-(\mathbf{k})e_-(\mathbf{k}) \\ \alpha^*(\mathbf{k}) &= \alpha_+^*(\mathbf{k})e_+^*(\mathbf{k}) + \alpha_-^*(\mathbf{k})e_-^*(\mathbf{k})\end{aligned}\quad (41)$$

Calculons le produit vectoriel $\alpha^*(\mathbf{k}) \times \alpha(\mathbf{k})$ à partir de ces deux développements. En utilisant :

$$\begin{aligned}e_+^* \times e_+ &= \frac{1}{2}(\mathbf{e}_1 - i\mathbf{e}_2) \times (\mathbf{e}_1 + i\mathbf{e}_2) = \frac{i}{2}(\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2) = i\boldsymbol{\kappa} \\ e_-^* \times e_- &= \frac{1}{2}(\mathbf{e}_1 + i\mathbf{e}_2) \times (\mathbf{e}_1 - i\mathbf{e}_2) = \frac{-i}{2}(\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2) = -i\boldsymbol{\kappa} \\ e_+^* \times e_- &= \frac{-1}{2}(\mathbf{e}_1 - i\mathbf{e}_2) \times (\mathbf{e}_1 - i\mathbf{e}_2) = 0 = e_-^* \times e_+\end{aligned}\quad (42)$$

on obtient :

$$\mathbf{S}_R = \int d^3k \left\{ [\alpha_+^*(\mathbf{k})\alpha_+(\mathbf{k})] \hbar\boldsymbol{\kappa} - [\alpha_-^*(\mathbf{k})\alpha_-(\mathbf{k})] \hbar\boldsymbol{\kappa} \right\}\quad (43)$$

La forme “diagonale vis-à-vis des variables de spin” de l’expression (43) a une signification physique claire : à chaque onde plane, de vecteur d’onde \mathbf{k} et de polarisation circulaire droite (gauche) par rapport à \mathbf{k} , correspondent des photons d’impulsion $\hbar\mathbf{k}$ et de moment cinétique de spin $+\hbar$ ($-\hbar$) le long de la direction $\boldsymbol{\kappa}$ de \mathbf{k} . Lors de la quantification de la théorie, quand les variables normales $\alpha^*(\mathbf{k})$ et $\alpha(\mathbf{k})$ sont remplacées par des opérateurs de création et d’annihilation, l’expression (43) devient :

$$\hat{\mathbf{S}}_R = \int d^3k \left\{ [\hat{a}_+^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}_+(\mathbf{k})] \hbar\boldsymbol{\kappa} - [\hat{a}_-^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}_-(\mathbf{k})] \hbar\boldsymbol{\kappa} \right\}\quad (44)$$

L’opérateur $\hat{a}_+^\dagger(\mathbf{k})$ crée un photon d’impulsion $\hbar\mathbf{k}$ et de moment cinétique de spin $+\hbar$ le long de la direction $\boldsymbol{\kappa}$ de \mathbf{k} ; l’opérateur $\hat{a}_+(\mathbf{k})$ l’annihile ; enfin l’opérateur $\hat{a}_+^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}_+(\mathbf{k})$ correspond au nombre de photons dans ce mode. Une définition analogue s’applique au second terme de (44) avec un changement de signe du moment cinétique.

Hélicité

Les résultats précédents, conséquences du caractère transversal du champ libre, peuvent être exprimés en termes d’une quantité appelée “*hélicité*”. Par définition, l’hélicité du photon est la projection du moment cinétique de spin du photon le long de la direction $\boldsymbol{\kappa}$ du vecteur d’onde ; elle vaut $+1$ pour des photons de polarisation circulaire droite par rapport à $\boldsymbol{\kappa}$, et -1 pour des photons de polarisation circulaire gauche. Le caractère transversal du champ de rayonnement libre entraîne que les photons ne peuvent pas avoir une hélicité nulle. L’hélicité est un pseudo-scalaire : dans une réflexion d’espace, le vecteur polaire $\boldsymbol{\kappa}$ change de signe alors que le spin \mathbf{S} , vecteur axial, reste inchangé. Le produit scalaire de $\boldsymbol{\kappa}$ et \mathbf{S} change donc de signe (contrairement à un scalaire).

3-b. Mise en évidence expérimentale du moment cinétique de spin du rayonnement

Considérons une onde plane de vecteur d'onde \mathbf{k} et de polarisation ε . A partir des expressions du champ électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ et du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ données dans le Chapitre XVIII, on peut calculer simplement les deux termes de l'équation (28) qui donnent, dans l'espace des positions, l'expression du moment cinétique de spin et celle du moment cinétique orbital du rayonnement³. On trouve que le moment cinétique orbital du rayonnement – deuxième terme de (28) – est toujours nul, quelle que soit la polarisation ε ; pour le moment cinétique de spin – premier terme de (28) – il est nul pour une polarisation linéaire, mais non nul pour une polarisation circulaire, avec des signes opposés pour des polarisations circulaires droite et gauche. Ceci confirme, sur le cas simple d'une onde plane, les conclusions générales du paragraphe précédent.

Un tel résultat suggère de faire traverser une lame quart d'onde par un faisceau lumineux polarisé linéairement. Les photons incidents ont un moment cinétique de spin nul avant la traversée de la lame, égal à $+\hbar$ ($-\hbar$) après traversée de la lame, si cette dernière transforme la polarisation linéaire incidente en polarisation circulaire droite (gauche). Le moment cinétique de spin du rayonnement change donc après traversée de la lame et ce changement doit s'accompagner d'un changement dans le sens opposé du moment cinétique de la lame. En suspendant la lame à un fil de torsion, on doit donc observer une rotation de la lame induite par le rayonnement incident qui apparaît dans un sens opposé à celui de la polarisation circulaire du rayonnement émergent. Cette expérience, suggérée par A. Kastler [28] a été réalisée par R. Beth [29] et a confirmé l'existence d'un transfert de moment cinétique

Remarque

Un paradoxe surgit quand on calcule, toujours pour une onde plane, le moment cinétique total du rayonnement donné par l'équation (20). Dans une onde plane, le vecteur de Poynting $\mathbf{\Pi}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r})$ est toujours parallèle au vecteur d'onde \mathbf{k} en tout point \mathbf{r} , quelle que soit la polarisation. L'intégrale dans tout l'espace de $\mathbf{r} \times \mathbf{\Pi}(\mathbf{r})$ est donc nulle. Comme le moment cinétique orbital est lui aussi nul, il semble donc que le moment cinétique de spin doit être nul lui aussi, quelle que soit la polarisation. La solution de ce paradoxe est que la représentation du rayonnement par une onde plane infinie n'est pas physique. Tout faisceau lumineux a une extension spatiale finie. Les auteurs de [30] (voir aussi [31]) montrent que la polarisation circulaire au centre du faisceau change quand l'amplitude du champ change au voisinage des bords du faisceau. La prise en compte quantitative de cet effet redonne bien le résultat obtenu plus haut, à savoir que le moment cinétique de spin du faisceau est égal à la somme des moments cinétiques $\pm\hbar$ des photons de ce faisceau.

3-c. Moment cinétique orbital du rayonnement

Une différence importante entre les moments cinétiques orbital et de spin du rayonnement apparaît clairement sur l'expression (28) : la définition du moment cinétique orbital fait intervenir un point de référence O, puisque le vecteur \mathbf{r} défini par rapport à ce point apparaît explicitement dans l'expression du moment cinétique orbital. Il n'en est pas de même pour le moment cinétique de spin qui, pour cette

3. Ce sont en effet ces deux termes qui, lors du passage dans l'espace réciproque, puis de l'introduction des variables normales, vont donner naissance aux deux termes du second membre de l'équation (33); par comparaison avec l'expression du moment cinétique d'une particule de spin 1, ces termes ont été interprétés comme les deux composantes du moment cinétique du rayonnement.

raison, est parfois appelé moment cinétique “intrinsèque”. En fait, il existe au moins deux situations pour lesquelles le choix du point O s’impose naturellement, situations que nous analysons maintenant.

$\alpha.$ Ondes multipolaires

Quand on analyse le rayonnement émis ou absorbé par un atome ou un noyau entre deux états discrets, le choix du centre de masse de l’atome ou du noyau comme origine est naturel pour analyser les échanges de moment cinétique entre les variables internes du système atomique et les photons. Dans le complément suivant C_{XIX}, nous étudions par exemple les échanges de moment cinétique entre les variables internes d’un atome et les photons dans un cas particulier : une transition dipolaire électrique traitée avec l’approximation des grandes longueurs d’onde. Dans les expressions qui décrivent l’absorption d’un photon, seules interviennent alors les variables de polarisation du rayonnement, et donc le moment cinétique de spin des photons ; le moment cinétique orbital du rayonnement ne semble jouer aucun rôle⁴.

Il existe d’autres transitions, surtout dans les noyaux atomiques, où la variation de moment cinétique interne entre les deux états de la transition est supérieur ou égal à 2 ; le moment cinétique de spin du photon, égal à 1, ne suffit plus pour assurer la conservation du moment cinétique total. Il faut faire alors intervenir des états du rayonnement de moment cinétique total J supérieur à 1, ce qui implique nécessairement une contribution du moment cinétique orbital du rayonnement. Les ondes correspondant à ces états sont les “ondes multipolaires”.

L’idée la plus simple pour construire les ondes multipolaires de moment cinétique total caractérisé par les nombres quantiques J et M est de composer une harmonique sphérique $Y_\ell^{m_\ell}(\boldsymbol{\kappa})$ avec un spin $S = 1$; la première est fonction propre de \mathbf{L}^2 et L_z avec les valeurs propres $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ et $m_\ell\hbar$; le second possède trois états de spin $|S, m_S\rangle$, avec $m_S = +1, 0, -1$, isomorphes aux trois états de polarisation $\mathbf{e}_+, \mathbf{e}_z, \mathbf{e}_-$. On obtient ainsi une *harmonique sphérique vectorielle* :

$$Y_{J,\ell,1}^M(\boldsymbol{\kappa}) = \sum_{m_\ell} \sum_{m_S} \langle JM | \ell 1 m_\ell m_S \rangle Y_\ell^{m_\ell}(\boldsymbol{\kappa}) \mathbf{e}_{m_S} \quad (45)$$

fonction propre de $\mathbf{J}^2, \mathbf{L}^2, J_z$, avec les valeurs propres $J(J + 1)\hbar^2, \ell(\ell + 1)\hbar^2, M\hbar$. Dans cette équation, $\langle JM | \ell 1 m_\ell m_S \rangle$ est un coefficient de Clebsch-Gordan, et J peut prendre l’une des trois valeurs $J = \ell - 1, J = \ell, J = \ell + 1$ et $M = m_\ell + m_S$.

La difficulté est que les harmoniques sphériques vectorielles ne sont pas toutes des fonctions transverses et ne peuvent donc constituer une base de fonctions normales transverses pour développer le champ de rayonnement. Pour une valeur donnée de J , on peut cependant construire des superpositions linéaires des harmoniques sphériques vectorielles $\mathbf{Y}_{J,\ell,1}^M(\boldsymbol{\kappa})$ avec $\ell = J, \ell = J \pm 1$ qui sont transverses et qui ont de plus une parité bien définie $\pi = \pm 1$. On peut aussi multiplier chaque harmonique sphérique vectorielle, qui ne dépend que de la direction $\boldsymbol{\kappa}$ de \mathbf{k} , par $\delta(k - k_0)$, ce qui permet d’obtenir une fonction qui est aussi fonction propre de l’énergie, de valeur propre $\hbar\omega_0 = \hbar ck_0$. Les fonctions ainsi obtenues forment une base possible de variables normales transverses pour développer le champ ; elles sont caractérisées par

4. Ce moment cinétique orbital peut en revanche intervenir dans les échanges de moment cinétique avec les variables externes de l’atome, pour certains types de faisceaux lumineux, les faisceaux de Laguerre-Gauss (§ 3-b du Complément C_{XIX}).

quatre nombres quantiques : l'énergie $\hbar ck_0$, le moment cinétique total J, M , la parité π . Elles sont appelées ondes multipolaires électriques (pour $\pi = -1$) ou magnétiques (pour $\pi = +1$). Comme nous nous limitons dans cet ouvrage à des transitions dipolaires électriques ou magnétiques, nous ne donnerons pas ici l'expression générale des ondes multipolaires et renvoyons le lecteur au Complément B_I de [15] et à [32] pour plus de détails.

β. Faisceaux avec symétrie cylindrique autour d'un axe

Il arrive souvent qu'on étudie des faisceaux de symétrie cylindriques. C'est le cas par exemple de faisceaux gaussiens se propageant le long d'un axe z avec des sections transversales circulaires. Si l'on prend le point O de référence sur cet axe, la symétrie du faisceau entraîne que le moment cinétique orbital est nécessairement dirigé le long de l'axe z et qu'il garde la même valeur, quelle que soit la position du point O sur l'axe z . Si l'on prend un point de référence hors de l'axe, le moment cinétique orbital changera, mais pas sa composante L_z , qui manifeste ainsi un caractère intrinsèque.

Un cas particulièrement intéressant est celui des faisceaux de Laguerre-Gauss (LG) qui ont une dépendance en $\exp(im\varphi)$ vis-à-vis de l'angle azimutal φ repérant la direction du point courant dans le plan perpendiculaire à l'axe du faisceau. La symétrie cylindrique est préservée dans la mesure où une rotation d'un angle φ_0 du faisceau autour de l'axe z redonne le même champ à un facteur de phase global près $\exp(-im\varphi_0)$. L'utilisation de la relation (34) montre que la composante selon Oz du moment cinétique orbital de chacun des photons du faisceau LG est $m\hbar$.

Considérons un faisceau LG se propageant le long de l'axe z , de vecteur d'onde k le long de l'axe. La phase en un point de coordonnées cylindriques z, ρ, φ s'obtient à partir de l'exponentielle $\exp i(kz + m\varphi)$. Pour un faisceau gaussien ordinaire (pour lequel $m = 0$) les surfaces équiphases sont, au voisinage du foyer, des plans perpendiculaires à l'axe z . Quand $m \neq 0$, z et φ doivent varier tous deux pour que la phase reste constante, suivant la loi $kdz + md\varphi = 0$. Les surfaces équiphases sont donc des surfaces hélicoïdales engendrées par une demi-droite perpendiculaire à l'axe z et partant de cet axe, qui tourne de $-2\pi/m$ quand z augmente de λ . On conçoit alors que, dans ces conditions, apparaisse un moment cinétique orbital non nul du champ. Il faut enfin noter que le champ doit s'annuler sur l'axe z (sinon, la phase varierait de manière discontinue quand on traverse cet axe).

En conclusion, nous avons vu dans ce complément qu'il existe deux types de moment cinétique du rayonnement, de spin et orbital, et nous avons étudié leurs propriétés. Le photon apparaît comme une particule de spin 1, à ceci près qu'il n'a accès qu'à deux états internes (au lieu de trois) d'hélicités respectives $+1$ et -1 . Nous verrons dans le complément suivant comment les interactions entre rayonnement et atomes permettent de transférer le moment cinétique du premier aux seconds.

Complément C_{XIX}

Echanges de moment cinétique entre atomes et photons

1	Transfert de moment cinétique de spin aux variables atomiques internes	486
1-a	Transitions dipolaires électriques	486
1-b	Règles de sélection pour la polarisation	486
1-c	Conservation du moment cinétique total	488
2	Les méthodes optiques	488
2-a	La méthode de double résonance	489
2-b	Le pompage optique	492
2-c	Caractéristiques originales de ces méthodes	494
3	Transfert de moment cinétique orbital aux variables atomiques externes	495
3-a	Faisceaux de Laguerre-Gauss	495
3-b	Développement du champ en modes de Laguerre-Gauss	495

Introduction

Les échanges de moment cinétique entre atomes et photons sont à la base de plusieurs méthodes expérimentales qui ont joué un rôle important en physique atomique. Le but de ce complément est d’analyser les règles de sélection qui apparaissent dans les processus d’absorption et d’émission de photons par un atome ; elles traduisent la conservation du moment cinétique total du système atome + rayonnement au cours de ces processus.

Nous nous intéresserons surtout au transfert de moment cinétique aux variables internes de l’atome (§ 1). La polarisation du champ, qui caractérise le moment cinétique de spin de ce champ (Complément B_{XIX}), joue alors un rôle essentiel. Pour un processus d’absorption, nous établissons les règles de sélection qui relient la polarisation du champ à la variation du “nombre quantique magnétique” m caractérisant la projection du moment cinétique total interne de l’atome sur un axe donné. Deux applications importantes de ces règles de sélection seront alors décrites dans le § 2 : la méthode de la double résonance et la méthode du pompage optique. Nous verrons que le choix d’une polarisation adéquate pour la lumière excitatrice, ainsi que de la direction et de la polarisation de la lumière ré-émise par les atomes excités et observée par un détecteur, permet de contrôler les sous-niveaux Zeeman de l’atome qui sont peuplés et détectés par la lumière. Nous reviendrons dans le § 2 sur l’importance de cette sélectivité. Nous abordons enfin brièvement dans le § 3 le problème du transfert de moment cinétique orbital du rayonnement aux variables externes de l’atome.

1. Transfert de moment cinétique de spin aux variables atomiques internes

1-a. Transitions dipolaires électriques

Nous nous limitons ici au cas où les transitions entre états internes de l'atome sont des transitions dipolaires électriques. Comme nous l'avons vu dans le Chapitre XIX (§ C-4), l'hamiltonien d'interaction entre l'atome et le rayonnement peut alors être pris sous la forme :

$$\hat{H}_I = -\hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}}) \quad (1)$$

où $\hat{\mathbf{D}}$ est l'opérateur moment dipolaire électrique de l'atome et $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\hat{\mathbf{R}})$ l'opérateur champ électrique transverse du rayonnement évalué en $\hat{\mathbf{R}}$, position du centre de masse. Tous les résultats établis dans ce complément demeurent en fait valables pour des transitions dipolaires magnétiques ; il suffit de remplacer $\hat{\mathbf{D}}$ par le moment dipolaire magnétique $\hat{\mathbf{M}}$ de l'atome et $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}$ par l'opérateur champ magnétique du rayonnement $\hat{\mathbf{B}}$. Pour des transitions où un photon est absorbé, $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}$ et $\hat{\mathbf{B}}$ peuvent être remplacés par leurs composantes de fréquences positives $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}$ et $\hat{\mathbf{B}}^{(+)}$; pour celle où un photon est émis, ces champs doivent être remplacés par leurs composantes de fréquences négatives $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}^{(-)}$ et $\hat{\mathbf{B}}^{(-)}$.

Si l'on remplace $\hat{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}$ et $\hat{\mathbf{B}}^{(+)}$ par leurs développements en ondes planes, les variables internes n'apparaissent plus que dans le produit scalaire de $\hat{\mathbf{D}}$ ou $\hat{\mathbf{M}}$ avec le vecteur polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}$ de l'onde plane \mathbf{k} . Nous supposons dans les §§ 1 et 2 que tous les états du rayonnement incident sont des ondes planes, ou des superpositions linéaires d'ondes planes dont les vecteurs d'onde ont des directions très voisines de celle d'un axe optique (approximation paraxiale). Ces ondes ont toutes la même polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}$, ce qui suppose que l'ouverture angulaire du faisceau est suffisamment faible. Les transitions entre états atomiques internes a et b que nous considérerons sont donc entièrement caractérisées par les éléments de matrice $\langle b | \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{D}} | a \rangle$.

1-b. Règles de sélection pour la polarisation

Commençons par considérer le cas simple d'un atome à un seul électron et d'une transition reliant un état fondamental¹ g de moment cinétique orbital $\ell = 0$ à un état excité e de moment cinétique $\ell = 1$. Supposons que la polarisation du rayonnement soit circulaire droite, notée σ_+ , par rapport à un axe que nous noterons z : le champ électrique du rayonnement tourne à la fréquence angulaire ω dans le sens direct autour de l'axe z . On a :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{\varepsilon}_x + i\boldsymbol{\varepsilon}_y) \quad (2)$$

Comme $\hat{\mathbf{D}} = q\hat{\mathbf{r}}$, où q est la charge de l'électron et $\hat{\mathbf{r}}$ sa position par rapport au noyau, on a :

$$\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{D}} = -\frac{q}{\sqrt{2}}(x + iy) = -\frac{q}{\sqrt{2}}r \sin \theta \exp(i\varphi) \quad (3)$$

1. Dans ce complément, et afin de nous conformer au mieux avec la littérature dans le domaine, nous prendrons la notation g pour l'état fondamental (en anglais "ground") et e pour l'état excité (au lieu de prendre comme précédemment la notation a et b pour ces deux niveaux atomiques).

où r, θ, φ sont les coordonnées sphériques de l'électron par rapport au noyau. L'excitation en lumière de polarisation σ_+ , à partir de l'état fondamental de nombre quantique magnétique $m_g = 0$ (défini par rapport à l'axe z) sans dépendance en φ , crée donc une fonction d'onde de l'état excité qui a une dépendance en φ donnée par $\exp(i\varphi)$. Cette fonction d'onde est donc une fonction propre de la composante $\hat{L}_z = (\hbar/i)\partial/\partial\varphi$ du moment cinétique orbital, de valeur propre $+1$ – c'est-à-dire l'état $m_e = +1$. On montrerait de même qu'une excitation de polarisation σ_- , pour laquelle $\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varepsilon_x - i\varepsilon_y)$, porte l'atome dans l'état $m_e = -1$. Considérons enfin une excitation en polarisation π pour laquelle $\varepsilon = \varepsilon_z$: le champ électrique a une polarisation linéaire parallèle² à l'axe Oz . On a alors $\varepsilon \cdot \hat{D} = qz = qr \cos \theta$, sans dépendance en φ ; l'excitation porte donc l'atome dans l'état $m_e = 0$. En résumé, les règles de sélection sur la polarisation pour une transition $\ell_g = 0 \rightarrow \ell_e = 1$ sont données par :

$$\sigma_+ \rightarrow m_e = +1, \quad \pi \rightarrow m_e = 0 \quad \sigma_- \rightarrow m_e = -1. \quad (4)$$

Les résultats précédents peuvent être aisément généralisés à une transition quelconque reliant un état fondamental g de moment cinétique J_g à un état excité e de moment cinétique J_e , et à un nombre quelconque d'électrons. Il suffit d'utiliser le théorème de Wigner-Eckart (Complément D_X et exercice 8 du Complément G_X). L'opérateur dipôle \hat{D} (somme des opérateurs dipolaires de chacun des électrons) est un opérateur vectoriel dont les trois composantes sphériques \hat{D}_s avec $s = +1, 0, -1$ sont égales à :

$$\hat{D}_{+1} = \frac{-1}{\sqrt{2}}(\hat{D}_x + i\hat{D}_y) \quad (5a)$$

$$\hat{D}_0 = \hat{D}_z \quad (5b)$$

$$\hat{D}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{D}_x - i\hat{D}_y) \quad (5c)$$

Le théorème de Wigner-Eckart (Complément D_X) indique alors que :

$$\langle J_e, m_e | \hat{D}_s | J_g, m_g \rangle = \langle e | \hat{D} | g \rangle \langle J_e, m_e | J_g, 1; m_g, s \rangle \quad (6)$$

où $\langle J_e, m_e | J_g, 1; m_g, s \rangle$ est un coefficient de Clebsch-Gordan (chapitre X, § C-4-c) et $\langle e | \hat{D} | g \rangle$ est un "élément de matrice réduit" indépendant de m_g, s, m_e . Le coefficient de Clebsch-Gordan n'est différent de zéro que si :

- on peut former un triangle avec $J_e, 1$ et J_g , ce qui entraîne que J_e doit être égal, soit à J_g , soit à $J_g \pm 1$, la transition $J_e = 0 \leftrightarrow J_g = 0$ étant interdite ;
- $m_e = m_g + s$.

Comme les trois valeurs de s ($s = +1, 0, -1$) correspondent aux trois polarisations σ_+, π, σ_- respectivement, les règles de sélection (4) pour une transition $J_g \leftrightarrow J_e$ quelconque se généralisent aisément et deviennent (Figure 1) :

$$\sigma_+ \rightarrow m_e = m_g + 1, \quad \pi \rightarrow m_e = m_g \quad \sigma_- \rightarrow m_e = m_g - 1 \quad (7)$$

². A cause de la transversalité du champ, le faisceau lumineux se propage alors nécessairement le long d'un axe perpendiculaire à l'axe Oz .

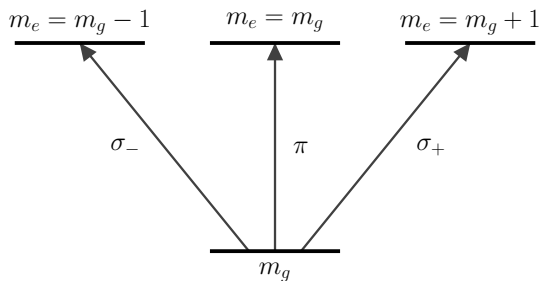


FIGURE 1 – Règles de sélection pour une transition dipolaire, électrique ou magnétique. Le nombre quantique magnétique m augmente d'une unité pour une excitation en polarisation σ_+ , est inchangé pour une excitation en polarisation π , et diminue d'une unité pour une excitation en polarisation σ_- .

1-c. Conservation du moment cinétique total

Nous avons vu que, lorsque l'atome absorbe un photon de polarisation σ_+ par rapport à un axe z , la composante de son moment cinétique le long de cet axe augmente de $+1$ en unités de \hbar . La conservation du moment cinétique total entraîne donc que le photon σ_+ absorbé doit avoir un moment cinétique $+\hbar$ le long de l'axe z .

Ce résultat peut également être obtenu à partir de l'étude du moment cinétique du rayonnement présentée dans le Complément B_{XIX}. En effet, bien que l'hamiltonien d'interaction relatif aux variables internes ne dépende pas du vecteur d'onde \mathbf{k} du photon³, on peut toujours prendre un vecteur d'onde \mathbf{k} parallèle à l'axe de quantification (puisque ces deux axes sont perpendiculaires au vecteur polarisation d'une onde circulaire). Or, nous avons vu dans le Complément B_{XIX} que, dans une onde plane (ou dans un faisceau d'ondes planes d'ouverture angulaire faible), un photon de polarisation σ_+ par rapport au vecteur d'onde possède un moment cinétique total (qui se réduit à son moment cinétique de spin) égal à $+\hbar$ et parallèle à son vecteur d'onde. Le moment cinétique total est donc bien conservé.

2. Les méthodes optiques

Les règles de sélection sur la polarisation entraînent qu'il est possible d'exciter sélectivement un sous-niveau Zeeman de l'état excité d'un atome. De même, nous verrons plus loin que l'observation de la lumière émise dans une direction et avec une polarisation donnée permet de déterminer à partir de quel sous-niveau la lumière est émise. Une telle sélectivité dans l'excitation et la détection est à la base des méthodes optiques de la spectroscopie hertzienne dont nous donnons ici deux exemples.

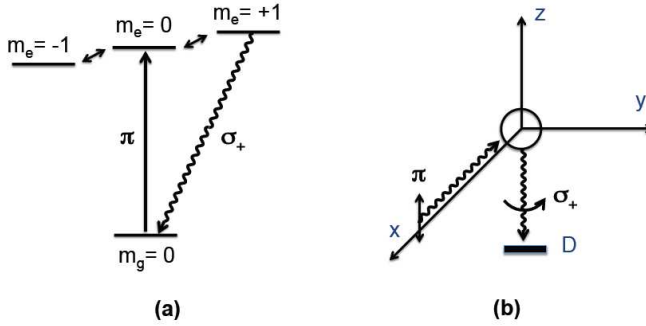


FIGURE 2 – Diagramme d'énergie et structure Zeeman de la transition $6^1S_0 \rightarrow 6^3P_1$ des isotopes pairs du mercure à 253.7 nm (Fig. a). Un champ magnétique statique, appliqué le long de l'axe z lève la dégénérescence de l'état excité et fait apparaître trois sous-niveaux Zeeman équidistants : $m_e = -1, 0, +1$. Un faisceau lumineux résonnant, se propageant le long de l'axe x et ayant une polarisation linéaire π , parallèle à l'axe z (Fig. b), excite sélectivement les atomes dans le sous-niveau $m_e = 0$ (flèche montante de la Fig. a). Pendant leur séjour dans l'état excité, les atomes sont transférés de l'état $m_e = 0$ aux états $m_e = \pm 1$ par un champ de radiofréquence résonnant (petites flèches obliques de la Fig. a). Un détecteur D placé le long de l'axe z , précédé d'un analyseur qui ne laisse passer que la lumière de polarisation σ_+ le long de l'axe z , détecte la lumière émise par les atomes (Fig. b). Le détecteur n'est alors sensible qu'à la lumière émise à partir du sous-niveau $m_e = +1$ (flèche ondulée de la Fig. a); il fournit donc un signal proportionnel à la population de ce sous-niveau.

2-a. La méthode de double résonance

Nous exposerons ici le principe de la méthode sur l'exemple des isotopes pairs du mercure, sur lequel ont porté les premières propositions théoriques de Brossel et Kastler [33] ainsi que les premières études expérimentales de Brossel et Bitter [34]. Comme pour ces isotopes le spin nucléaire est nul, et comme dans l'atome de mercure toutes les couches électroniques sont remplies dans l'état fondamental, le diagramme d'énergie est particulièrement simple. L'état fondamental g possède un moment cinétique nul ($J_g = 0$), et les premiers états excités accessibles un moment cinétique $J_e = 1$. En présence d'un champ magnétique statique B appliqué le long de l'axe z , les trois sous-niveaux Zeeman $m_e = -1, 0, +1$ du niveau excité subissent des déplacements Zeeman proportionnels à m_e et au champ appliqué, de sorte que l'énergie de l'état m_e s'écrit :

$$E_{m_e} = E_0 + g_L m_e \mu_B B \quad (8)$$

où E_0 est l'énergie de l'état excité en l'absence de champ, g_L le facteur de Landé de cet état, μ_B le magnéton de Bohr. L'état fondamental $J_g = 0, m_g = 0$, d'énergie prise égale à zéro, n'est pas affecté par le champ B (Figure 2a).

3. L'approximation des grandes longueurs d'onde fait disparaître dans l'hamiltonien d'interaction relatif aux variables internes toute trace du vecteur d'onde \mathbf{k} du rayonnement. Ce vecteur d'onde n'apparaît que dans la partie de l'hamiltonien d'interaction, $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$, relative aux variables externes.

La méthode de double résonance consiste à exciter sélectivement, au moyen d'un faisceau lumineux résonnant de polarisation π , les atomes dans le sous-niveau $m_e = 0$. Le faisceau excitateur se propage par exemple le long de l'axe x avec une polarisation ε_z perpendiculaire à l'axe x et parallèle à l'axe z , donc de polarisation π (Figure 2b).

Si les atomes n'étaient soumis à aucune perturbation dans l'état excité pendant la durée de vie radiative $\tau_R = 1/\Gamma$ de cet état (de l'ordre de $1.55 \cdot 10^{-7}$ sec), ils resteraient dans ce sous-niveau pendant leur séjour dans l'état excité. En revanche, si l'on applique un champ de radiofréquence résonnant⁴ suffisamment intense pour les faire passer de $m_e = 0$ à $m_e = \pm 1$ pendant la durée de vie τ_R de l'état excité, les deux états $m_e = \pm 1$ se peuplent également.

Peut-on, par observation de la lumière émise par les atomes lors de leur retombée dans l'état fondamental par émission spontanée d'un photon, déterminer à partir de quel sous-niveau m_e cette lumière est émise et obtenir ainsi un signal proportionnel à la population de ce sous-niveau ? L'analyse de ce problème nécessite plus de précautions que celle du processus d'absorption. Une fois porté dans le sous-niveau m_e , l'atome peut en effet émettre dans toutes les directions et avec toutes les polarisations possibles, qui ne sont pas nécessairement les trois polarisations de base σ_+ , π ou σ_- . Nous allons voir qu'on peut cependant placer le détecteur dans une direction donnée, loin de l'atome, et placer devant le détecteur un analyseur de polarisation convenablement choisi de manière à pouvoir déterminer à partir de quel sous-niveau le photon détecté a été émis.

Pour démontrer ce résultat, il est important d'étudier tout d'abord comment oscille le dipôle atomique associé à une transition $m_g \longleftrightarrow m_e$. Plaçons le détecteur sur l'axe z où se trouve l'atome.

(i) Pour la transition $m_e = 0 \longleftrightarrow m_g = 0$, le dipôle oscillant le long de l'axe z n'émet pas le long de cet axe. Le détecteur ne reçoit donc aucune fraction de la lumière émise par un atome dans l'état $m_e = 0$.

(ii) En revanche, le dipôle associé à la transition $m_g = 0 \longleftrightarrow m_e = +1$, qui tourne dans le sens direct autour de l'axe z dans un plan perpendiculaire à cet axe, émet le long de cet axe une lumière de polarisation σ_+ , qui donne un signal sur le détecteur si ce dernier est précédé d'un analyseur qui sélectionne la polarisation circulaire droite. Cet analyseur bloque toutefois la lumière émise par un atome dans le sous-niveau $m_e = -1$, puisqu'elle a une polarisation circulaire gauche.

Ainsi, en plaçant un détecteur dans une position bien choisie, précédé d'un analyseur sélectionnant une polarisation appropriée, on peut isoler la lumière émise à partir d'un certain sous-niveau m_e unique, et obtenir ainsi un signal proportionnel à la population de ce sous-niveau.

Le principe de l'expérience de double résonance consiste donc à exciter sélectivement les atomes dans le sous-niveau $m_e = 0$, puis à détecter, par observation de la lumière σ_+ émise le long de l'axe z , les variations du nombre d'atomes transférés dans le sous-niveau $m_e = +1$ par un champ de radiofréquence de fréquence angulaire ω_{RF} proche de la fréquence Zeeman $\omega_Z = g_L \mu_B B / \hbar$. En observant les variations de la lumière émise, quand on balaye ω_{RF} à champ magnétique fixé, ou quand on balaye

4. Les atomes sont ainsi soumis à deux excitations résonnantes : une excitation optique résonnante qui les fait passer de $m_g = 0$ à $m_e = 0$; une excitation radiofréquence résonnante qui les fait passer de $m_e = 0$ à $m_e = \pm 1$. C'est là l'origine de la dénomination "double résonance" donnée à cette méthode.

le champ magnétique à ω_{RF} fixé, on détecte optiquement la résonance magnétique dans l'état excité.

Remarque

Que se passe-t-il si la lumière émise par l'atome n'est pas observée le long de l'axe z avec un analyseur circulaire droit, mais avec un détecteur placé le long de l'axe y précédé d'un analyseur sélectionnant la polarisation linéaire parallèle à l'axe x et donc perpendiculaire à l'axe z , polarisation appelée "sigma"⁵ ? La lumière émise le long de l'axe y par l'atome dans l'état $m_e = 0$ a une polarisation linéaire parallèle à celle du dipôle oscillant, donc parallèle à l'axe z . Elle est bloquée par l'analyseur sigma qui n'est sensible qu'à la polarisation perpendiculaire. En revanche, que l'atome soit dans le sous-niveau $m_e = +1$ ou $m_e = -1$, le dipôle tournant dans le plan xOy (dans le sens direct ou inverse) émet dans ce plan une lumière de polarisation linéaire perpendiculaire à l'axe z ; elle peut donc exciter le détecteur de polarisation sigma, et fournir un signal proportionnel à la somme des populations des sous-niveaux $m_e = +1$ et $m_e = -1$. En fait, sous l'effet du champ de radiofréquence résonnant, l'atome est porté dans une superposition linéaire de ces deux sous-niveaux Zeeman. Il est apparu par la suite que les ondes émises à partir de $m_e = +1$ et $m_e = -1$ interféraient, ce qui fait apparaître des modulations à la fréquence $2\omega_{RF}$ dans l'intensité de la lumière σ détectée⁶. Le signal du détecteur contient donc une composante statique (en régime stationnaire), proportionnelle à la somme des populations des deux sous-niveaux Zeeman, qui est le signal utilisé dans la première expérience de double résonance, et un signal modulé à la fréquence $2\omega_{RF}$.

La forme de raie de résonance magnétique peut être calculée de manière exacte; elle conduit à des expressions analytiques qui sont en excellent accord avec les observations expérimentales. Le centre de la résonance donne le facteur de Landé de l'état excité, c'est-à-dire encore le moment magnétique de cet état. La largeur de la résonance, extrapolée à intensité de radiofréquence nulle pour éliminer l'élargissement radiatif, donne la largeur naturelle Γ de l'état excité.

Calcul de la forme de raie

L'excitation en raie large avec une polarisation π prépare de manière quasi instantanée l'atome dans l'état excité $m_e = 0$. En régime stationnaire, n_0 atomes sont excités par unité de temps dans cet état. L'atome évolue sous l'effet de l'interaction avec le champ de radiofréquence \mathbf{B}_1 et son état devient une superposition linéaire des 3 sous-niveaux $m_e = -1, 0, +1$. Supposons ce champ de radiofréquence tournant, ce qui permet d'introduire le référentiel tournant associé (Complément F_{IV}) où cette évolution se traduit par une simple rotation autour de \mathbf{B}_1 . En utilisant les matrices de rotation d'un spin 1, on peut donc calculer $P(m_e = 0 \rightarrow m_e = +1, t)$, probabilité pour que l'atome, initialement dans $m_e = 0$, aboutisse après un temps t dans l'état $m_e = +1$ [36]. A cause de la durée de vie radiative $\tau_R = 1/\Gamma$ des sous-niveaux excités, cette probabilité est réduite par un facteur $e^{-\Gamma t}$. On en déduit que le nombre d'atomes transférés en régime stationnaire dans l'état $m_e = +1$ est égal à⁷ :

$$N_{+1} = n_0 \int_0^\infty P(m_e = 0 \rightarrow m_e = +1, t) e^{-\Gamma t} dt \tag{9}$$

5. C'est la disposition utilisée dans la première expérience de double résonance [34].

6. De telles modulations, appelées "light beats", furent observées en 1959 [35].

7. Un calcul analogue peut être mené pour N_{-1} .

En utilisant l'expression de $P(m_e = 0 \rightarrow m_e = +1, t)$, on obtient finalement :

$$N_{+1} = \frac{n_0 \Omega^2}{2} \frac{4\delta^2 + \Gamma^2 + \Omega^2}{(\delta^2 + \Gamma^2 + \Omega^2)(4\delta^2 + \Gamma^2 + 4\Omega^2)} \quad (10)$$

Dans cette expression, Ω est la fréquence de Rabi associée au champ de radiofréquence \mathbf{B}_1 , proportionnelle à l'amplitude de ce champ ; $\delta = \omega_{\text{RF}} - \omega_Z$ est l'écart entre la fréquence ω_{RF} du champ RF et la fréquence Zeeman ω_Z associée à l'écart entre les sous-niveaux Zeeman, proportionnelle au champ statique B_0 . La résonance est tracée, soit en balayant la fréquence du champ RF, soit en balayant le champ statique, ce qui revient à balayer ω_Z .

2-b. Le pompage optique

La méthode du pompage optique a été proposée par A. Kastler [37] ; elle étend aux états fondamentaux des atomes les éléments essentiels de la méthode de double résonance. Elle introduit en outre la possibilité de réaliser, en régime stationnaire, des différences de population importantes entre les sous-niveaux Zeeman de l'état fondamental.

Nous en exposerons le principe dans le cas simple où le niveau fondamental g (ainsi que le niveau excité e) ne possède que deux sous-niveaux Zeeman $m_g = \pm 1/2$ (ou $m_e = \pm 1/2$ pour le niveau excité). Les idées introduites sur cet exemple demeurent valables pour des transitions plus compliquées où la dégénérescence de e et g est plus élevée.

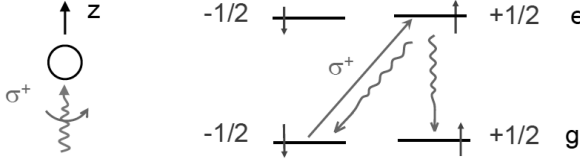


FIGURE 3 – Principe du pompage optique pour une transition $J_g = 1/2 \rightarrow J_e = 1/2$. L'absorption d'un photon résonnant de polarisation σ^+ excite sélectivement la transition $m_g = -1/2 \rightarrow m_e = 1/2$. Une fois dans l'état excité, l'atome retombe par émission spontanée dans les états $m_g = \pm 1/2$. Quand il aboutit dans l'état $m_g = +1/2$, il ne peut plus absorber de photon incident et demeure dans cet état (car il n'existe pas de transition σ^+ partant de $m_g = +1/2$ où les atomes s'accumulent). De plus, toute variation de la différence de populations entre les sous-niveaux $m_g = \pm 1/2$ peut être détectée par une modification de l'absorption du faisceau incident, puisque cette absorption n'est possible qu'à partir du sous-niveau $m_g = -1/2$.

Le principe du pompage optique est illustré sur la figure 3. Les atomes sont excités par un faisceau résonnant de polarisation σ^+ se propageant le long de l'axe z (partie gauche de la figure). Un champ magnétique statique est également appliqué le long de cet axe. L'absorption d'un photon résonnant de polarisation σ^+ ne peut exciter sélectivement que la transition $m_g = -1/2 \rightarrow m_e = 1/2$ au cours de laquelle le nombre quantique magnétique m augmente d'une unité. Une fois dans l'état excité, au bout d'un temps moyen $\tau_R = 1/\Gamma$ l'atome retombe par émission spontanée dans les états $m_g = \pm 1/2$, avec des probabilités proportionnelles aux

carrés des coefficients de Clebsch-Gordan. S'il tombe dans l'état $m_g = -1/2$, il peut absorber de nouveau un photon σ_+ . Au bout d'un certain nombre de cycles, il tombe dans l'état $m_g = +1/2$. Il ne peut plus alors absorber de photon incident, et demeure dans cet état (aucune transition σ^+ ne part de $m_g = +1/2$). Les atomes s'accumulent donc dans ce sous-niveau. Les cycles d'absorption d'un photon σ_+ à partir de l'état $m_g = -1/2$ suivie d'une émission spontanée d'un photon qui transfère l'atome dans le sous-niveau $m_g = +1/2$ peuvent être considérés comme une "pompe optique" qui vide le sous-niveau $m_g = -1/2$ pour remplir le sous-niveau $m_g = +1/2$, d'où le nom de "pompage optique".

Bilan des échanges de moment cinétique

Au cours d'un cycle de pompage optique, l'atome gagne un moment cinétique $+\hbar$ puisqu'il passe de l'état $m_g = -1/2$ à l'état $m_g = +1/2$. Le rayonnement perd une unité de moment cinétique \hbar lors de l'absorption du photon σ_+ . Comme le moment cinétique total du système atome + rayonnement est conservé, le moment cinétique du rayonnement émis par l'atome passant par émission spontanée de l'état $m_e = +1/2$ à l'état $m_g = +1/2$ doit être nul.

Pour démontrer directement que le rayonnement perd en moyenne un moment cinétique nul au cours de cette transition, il faut tenir compte du fait que l'atome passant de l'état $m_e = +1/2$ à l'état $m_g = +1/2$ émet une onde sphérique dans toutes les directions et avec toutes les polarisations transverses possibles ; il serait donc incorrect de dire que l'atome émet juste un photon de polarisation π , ce qui impliquerait qu'il émet seulement des photons avec un vecteur d'onde perpendiculaire à l'axe z . En fait, il faut calculer le moment cinétique total (orbital et de spin) de l'onde sphérique qu'il émet en passant de $m_e = +1/2$ à $m_g = +1/2$. Nous ne détaillerons pas ici un tel calcul, pour lequel il est judicieux de développer le champ, non pas en ondes planes, mais en ondes multipolaires⁸ (Complément B_{XIX}, § 3-c- α). Ces dernières sont des modes du champ caractérisés par quatre nombres quantiques : le nombre d'ondes k (ou l'énergie), la parité qui vaut $+1$ ou -1 , le moment cinétique total J qui est un entier, et enfin la composante M_J du moment cinétique sur l'axe z de quantification qui varie par changements d'une unité de $-J$ à $+J$. Pour une transition dipolaire électrique telle que celle étudiée ici, la parité vaut -1 , le moment cinétique total J est égal à 1 . On peut montrer que M_J est égal à 0 quand l'atome passe de m_e à $m_g = m_e$; il est égal à ± 1 quand l'atome passe de m_e à $m_g = m_e \mp 1$.

Le langage correct pour décrire la retombée par émission spontanée est donc le suivant : pour une transition $J_e = 1/2 \leftrightarrow J_g = 1/2$, un atome dans $m_e = +1/2$ peut retomber, soit dans l'état $m_g = -1/2$ par émission d'un photon dipolaire électrique $M_J = +1$, soit dans l'état $m_g = +1/2$ par émission spontanée d'un photon dipolaire électrique $M_J = 0$. Cette corrélation entre m_g et M_J est due à la conservation du moment cinétique total, elle-même due à l'invariance par rotation de l'hamiltonien d'interaction. L'état final de l'atome après l'émission spontanée est donc un état intriqué, superposition de l'état $|m_g = -1/2\rangle \otimes |M_J = +1\rangle$ et de l'état $|m_g = +1/2\rangle \otimes |M_J = 0\rangle$ avec des coefficients pondérés par les coefficients de Clebsch-Gordan des deux transitions atomiques, provenant des éléments de matrice du dipôle. On retrouve ainsi les vitesses avec lesquelles se repeuplent les sous-niveaux fondamentaux, les rapports de branchement étant donnés par les carrés des coefficients de Clebsch-Gordan.

La lumière joue un double rôle dans ces expériences. D'une part, comme nous venons de le voir, elle permet de polariser les atomes en les accumulant dans un

8. Le lecteur intéressé peut trouver un exposé détaillé sur les propriétés des ondes multipolaires dans le Complément B_I de [15] et dans [32]

sous-niveau de l'état fondamental; elle permet également de détecter optiquement cette polarisation des atomes. La lumière σ_+ absorbée par les atomes, ne pouvant l'être qu'à partir du sous-niveau $m_g = -1/2$, fournit en effet un signal proportionnel à la population de ce sous-niveau. Toute variation de la différence de population entre les sous-niveaux $m_g = -1/2$ et $m_g = +1/2$, qui pourrait être induite par un champ de radiofréquence résonnant ou par des collisions, peut donc être détectée par une variation de la quantité de lumière absorbée.

2-c. Caractéristiques originales de ces méthodes

Il est intéressant de passer en revue quelques caractéristiques originales des méthodes optiques qui permettent de comprendre pourquoi elles ont joué un rôle si important dans le développement de la physique atomique.

- Quand elle est apparue, la méthode de double résonance était l'une des premières à étendre les techniques de la résonance magnétique aux états atomiques excités. Ces techniques avaient été mises au point sur des états fondamentaux ou des états métastables de très longue durée de vie et utilisaient essentiellement des jets atomiques ou moléculaires : des dispositifs de sélection de type Stern-Gerlach sélectionnaient des atomes dans des états internes donnés; les basculements des spins par un champ RF modifiaient la trajectoire des atomes ou molécules et c'est cette modification des trajectoires qui permettait le plus souvent de détecter la résonance magnétique (voir par exemple la référence [38]). La très courte durée de vie des états excités ne permettait pas d'étendre ces techniques aux états excités.
- Une caractéristique intéressante des méthodes optiques est leur sélectivité, tant pour l'excitation que pour la détection. Cette sélectivité repose sur la polarisation de la lumière et non sur la fréquence de la lumière. La largeur des sources spectrales utilisées à l'époque et la largeur Doppler des raies des atomes contenus dans un ballon de verre étaient considérablement plus grandes que les écarts entre les raies optiques reliant les sous-niveaux Zeeman de l'état fondamental à ceux de l'état excité; il était donc exclu de pouvoir exciter ou détecter une seule composante Zeeman de la raie optique.
- Les mesures des structures Zeeman ou hyperfine dans l'état excité par la méthode de double résonance sont des mesures de haute résolution. Ces structures ne sont pas déterminées par une mesure de la différence entre les fréquences de deux raies optiques, mais par une mesure directe de la structure. Dans le domaine radiofréquence ou microonde, la largeur Doppler est négligeable, et la résolution des mesures n'est limitée que par la largeur naturelle.
- Les méthodes optiques ont une très grande sensibilité. Une transition de radiofréquence entre deux sous-niveaux de l'état excité ou fondamental n'est pas détectée par la perte ou le gain d'énergie du champ de radiofréquence dans une telle transition mais sur un photon optique absorbé ou ré-émis, qui transporte une énergie beaucoup plus élevée que celle d'un photon RF, et qui n'a pas la même polarisation suivant que l'atome est dans un sous-niveau ou dans l'autre. Il est ainsi possible de détecter la résonance magnétique sur un milieu très dilué comme une vapeur.
- Le pompage optique permet de réaliser des taux de polarisation dans l'état

fondamental très élevés, qui peuvent atteindre 90 %. De tels taux sont considérablement plus élevés que ceux qu'il serait possible d'obtenir à l'équilibre thermodynamique, compte tenu des valeurs très faibles des écarts Zeeman entre sous-niveaux de l'état fondamental et de la valeur élevée des températures auxquelles sont réalisées les expériences : les facteurs de Boltzmann $\exp(-h\nu_Z/k_B T)$ sont alors tous très peu différents de 1. Notons d'ailleurs que le pompage optique permet aisément, par un choix convenable de la polarisation, de peupler davantage les sous-niveaux Zeeman du niveau fondamental g d'énergie la plus grande. Il s'agit là d'un des premiers exemples de méthode permettant de réaliser des inversions de populations, une condition essentielle pour l'obtention de l'effet maser et de l'effet laser.

Le lecteur désireux d'obtenir plus de détails sur les méthodes optiques et sur les applications auxquelles elles ont donné naissance pourra consulter l'ouvrage plus documenté [23] et les références qu'il propose.

3. Transfert de moment cinétique orbital aux variables atomiques externes

3-a. Faisceaux de Laguerre-Gauss

Les faisceaux lumineux utilisés dans les expériences de physique atomique ou d'optique sont souvent des faisceaux gaussiens, superpositions linéaires d'ondes planes dont les vecteurs d'onde ont des directions voisines de celle d'un axe optique (approximation paraxiale). Si la polarisation ε est la même pour toutes les ondes planes du faisceau gaussien, dans les plans perpendiculaires à l'axe du faisceau la phase du champ n'a aucune dépendance vis-à-vis de la variable azimutale φ repérant la direction autour de l'axe du faisceau. De nouveaux types de faisceaux gaussiens ont pu être réalisés récemment⁹, appelés faisceaux de *Laguerre-Gauss* (LG), pour lesquels le champ a une dépendance azimutale en $\exp im\varphi$, où $m = \pm 1, \pm 2, \dots$, dans les plans perpendiculaires à l'axe du faisceau. Nous avons déjà mentionné l'existence de ces faisceaux dans le § 3-c- β du Complément B_{XIX}. Montrons maintenant comment l'absorption de photons appartenant à ces faisceaux peut transférer au centre de masse de l'atome un moment cinétique orbital non nul autour de l'axe du faisceau lumineux.

3-b. Développement du champ en modes de Laguerre-Gauss

Les modes LG constituent une base possible pour développer un champ quelconque. Ils sont caractérisés par trois nombres quantiques : le nombre d'onde k , le nombre p de nœuds dans la direction radiale, et le nombre entier m caractérisant la dépendance de la phase avec l'angle azimutal φ . Nous supposons que la polarisation ε est uniforme dans le faisceau. Plaçons-y un atome et utilisons la base $\varepsilon F_{k,p,m}(\mathbf{r})$ de modes LG. Au lieu de s'écrire $\langle \psi_{\text{fin}}^{\text{ext}} | \exp(i \mathbf{k}_i \cdot \hat{\mathbf{R}}) | \psi_{\text{in}}^{\text{ext}} \rangle$, l'élément de matrice relatif aux variables externes de l'hamiltonien d'interaction devient maintenant dans cette base :

$$\langle \psi_{\text{fin}}^{\text{ext}} | F_{k,p,m}(\hat{\mathbf{R}}) | \psi_{\text{in}}^{\text{ext}} \rangle \quad (11)$$

9. La méthode la plus utilisée pour réaliser de tels faisceaux consiste à faire diffracter un faisceau gaussien par des hologrammes calculés numériquement. Pour une revue sur les propriétés de ces faisceaux et sur leurs applications, voir la référence [39].

Cette relation montre que la fonction d'onde initiale $\psi_{\text{in}}^{\text{ext}}(\mathbf{R})$ du centre de masse de l'atome est multipliée par la fonction $F_{k,p,m}(\mathbf{R})$ caractérisant le mode. Le facteur de phase $\exp(im\varphi)$ est en quelque sorte "imprimé" sur la fonction d'onde initiale. L'équation (11) exprime que l'amplitude de transition des variables externes induite par l'hamiltonien d'interaction est égale au produit scalaire de $F_{k,p,m}(\mathbf{R})\psi_{\text{in}}^{\text{ext}}(\mathbf{R})$ par la fonction d'onde finale du centre de masse $\psi_{\text{fin}}^{\text{ext}}(\mathbf{R})$.

Supposons que l'état initial externe de l'atome ait un moment cinétique nul par rapport à l'axe z de sorte que $\psi_{\text{in}}^{\text{ext}}(\mathbf{R})$ ne dépende pas de l'angle φ . L'absorption d'un photon à partir d'un faisceau LG, de nombres quantiques k, p, m , fait apparaître dans le produit $F_{k,p,m}(\mathbf{R})\psi_{\text{in}}^{\text{ext}}(\mathbf{R})$ une dépendance en φ donnée par $\exp(im\varphi)$, de sorte que les seuls états finals possibles du centre de masse ont un moment cinétique orbital $m\hbar$ par rapport à l'axe z , puisque $L_z = (\hbar/i)\partial/\partial\varphi$. Le faisceau LG a donc transféré au centre de masse un moment cinétique orbital $m\hbar$. Il est important de noter que l'efficacité du transfert, décrite par l'élément de matrice (11), n'est appréciable que si les extensions spatiales des fonctions d'onde initiale et finale sont adaptées aux dimensions caractéristiques du faisceau LG. Au voisinage du foyer, la largeur du faisceau est de l'ordre du "col" w_0 , c'est-à-dire de l'ordre de quelques microns, beaucoup plus grande que les dimensions des paquets d'ondes atomiques, de l'ordre du nanomètre aux températures courantes ($T \simeq 300K$). On comprend ainsi pourquoi les transferts de moment cinétique orbital au centre de masse des atomes ne sont devenus intéressants que lorsqu'il a été possible de refroidir les atomes à des températures très basses, dans le domaine des microkelvins, voire des nanokelvins. Les ondes de matière ainsi obtenues, en particulier les condensats de Bose-Einstein, peuvent avoir des extensions spatiales de l'ordre de quelques microns. Le transfert de moment cinétique orbital par "impression de phase" devient alors utile pour générer des tourbillons quantiques (vortex, cf. Complément D_{XV}, § 3-b- β) dans les ondes de matière, situation où les atomes tournent en phase autour d'un axe. Cette méthode a été utilisée pour créer des vortex dans un condensat de Bose-Einstein dans un piège [40].

Chapitre XX

Absorption, émission, et diffusion de photons par un atome

A	Outil de base : l'opérateur d'évolution	498
A-1	Propriétés générales	499
A-2	Point de vue d'interaction	500
A-3	Composante de fréquences positives et composante de fréquences négatives du champ	502
B	Absorption de photons entre deux niveaux atomiques discrets	503
B-1	Rayonnement monochromatique	503
B-2	Rayonnement non monochromatique	506
C	Processus d'émission induite et d'émission spontanée .	510
C-1	Taux d'émission	510
C-2	Emission induite	511
C-3	Emission spontanée	512
C-4	Coefficients d'Einstein et loi de Planck	513
D	Rôle des fonctions de corrélation dans les processus à un photon	514
D-1	Processus d'absorption	514
D-2	Processus d'émission	516
E	Diffusion de photons par un atome	516
E-1	Diffusion élastique	516
E-2	Diffusion résonnante	520
E-3	Diffusion inélastique. Diffusion Raman	521

Introduction

Dans ce chapitre, nous utilisons les résultats établis dans le chapitre précédent pour étudier quelques processus élémentaires d'absorption et d'émission de photons par des atomes. Connaissant les hamiltoniens qui décrivent les niveaux d'énergie de l'atome et du rayonnement, ainsi que leurs interactions, nous pouvons maintenant nous attacher à résoudre l'équation de Schrödinger qui régit l'évolution du système atome plus champ. Le but poursuivi est de calculer l'amplitude de probabilité pour que ce système passe d'un certain état initial $|\varphi_i\rangle$ à l'instant t_i à un certain état final $|\varphi_f\rangle$ à un instant ultérieur t_f .

En mécanique quantique, l'évolution du vecteur d'état du système entre les instants t_i et t_f est régie par l'opérateur d'évolution $U(t_f, t_i)$. Cet opérateur apparaît donc comme l'outil de base pour calculer les amplitudes des divers processus étudiés dans ce chapitre. C'est pourquoi nous commençons dans le § A par rappeler un certain nombre d'équations satisfaites par $U(t_f, t_i)$, équations qui nous seront utiles pour les calculs présentés dans les sections suivantes.

Les premiers processus que nous étudierons ensuite dans le § B concernent l'absorption ou l'émission d'un photon par un atome effectuant une transition entre deux états discrets. Le rayonnement incident est supposé tout d'abord monochromatique, puis à large bande spectrale. Nous étudions au § C comment deux types d'émission se produisent au cours des processus d'interaction : l'émission induite, qui apparaît également dans un traitement semi-classique, et l'émission spontanée qui nécessite un traitement quantique du rayonnement. Nous établissons en particulier un lien avec la méthode suivie par Einstein pour retrouver la loi de Planck (qui donne la distribution spectrale du rayonnement du corps noir) et en tirer les coefficients d'absorption et d'émission. Le § D montre l'importance des fonctions de corrélation (celle du dipôle atomique et celle du champ incident) dans les calculs des probabilités de transition.

Un exemple important de processus qui met en jeu, non pas un, mais deux photons est la diffusion d'un photon par un atome, processus au cours duquel un photon incident est absorbé et un photon nouveau apparaît par émission spontanée ou stimulée. Le § E est consacré à l'étude de ce processus. Lorsque la fréquence du photon incident est proche de la fréquence de la transition atomique, la diffusion est dite "quasi résonnante" ; sa description nécessite un traitement non perturbatif. Nous nous inspirons des résultats du Complément D_{XIII} pour élaborer un tel traitement. Dans ce chapitre, nous nous restreindrons au cas où les niveaux atomiques sont discrets ; celui où ces niveaux comprennent un continuum sera traité dans le Complément B_{XX}.

A. Outil de base : l'opérateur d'évolution

L'opérateur unitaire d'évolution $U(t, t_0)$ a été défini au Complément F_{III} ; il permet d'obtenir l'état d'un système quantique à un instant t à partir de l'état de ce système à un instant antérieur t_0 :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \tag{A-1}$$

C'est un opérateur unitaire :

$$U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = \mathbb{1} \tag{A-2}$$

Si $H(t)$ désigne l'hamiltonien, $U(t, t_0)$ obéit à l'équation différentielle :

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0) \quad (\text{A-3})$$

avec la condition initiale $U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$. L'équation intégrale :

$$U(t, t_0) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t')U(t', t_0) \quad (\text{A-4})$$

est équivalente à l'ensemble de l'équation différentielle et de sa condition initiale. Si l'hamiltonien est indépendant du temps, l'expression de l'opérateur d'évolution est simplement :

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (\text{A-5})$$

A-1. Propriétés générales

Dans tout ce chapitre, nous utiliserons l'opérateur d'évolution pour exprimer l'amplitude de probabilité $A_{fi}(t_f, t_i)$ pour que le système, initialement dans l'état initial $|\varphi_i\rangle$ à l'instant t_i , soit trouvé dans l'état $|\varphi_f\rangle$ à l'instant t_f :

$$A_{fi}(t_f, t_i) = \langle \varphi_f | U(t_f, t_i) | \varphi_i \rangle \quad (\text{A-6})$$

Considérons l'hamiltonien total H :

$$H = H_A + H_R + H_I = H_0 + H_I \quad (\text{A-7})$$

où $H_0 = H_A + H_R$ est l'hamiltonien non perturbé (somme de l'hamiltonien H_A de l'atome isolé et de l'hamiltonien H_R du rayonnement libre) et H_I est l'hamiltonien d'interaction (entre l'atome et le champ). Les opérateurs d'évolution U_0 et U associés respectivement à H_0 et H s'écrivent :

$$U_0(t, t_0) = e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} \quad (\text{A-8a})$$

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (\text{A-8b})$$

Ces opérateurs sont reliés par l'équation intégrale :

$$U(t, t_0) = U_0(t, t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' U_0(t, t') H_I U(t', t_0) \quad (\text{A-9})$$

Pour démontrer cette relation, prenons la dérivée de ses deux membres (en tenant compte de la dérivée par rapport à la borne supérieure de l'intégrale, qui s'ajoute à celle de la fonction à intégrer) :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) &= H_0 U_0(t, t_0) + U_0(t, t) H_I U(t, t_0) \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_0 U_0(t, t') H_I U(t', t_0) \end{aligned} \quad (\text{A-10})$$

soit, puisque $U_0(t, t) = \mathbb{1}$ et compte tenu de (A-9) :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) &= H_I U(t, t_0) + H_0 \left[U_0(t, t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' U_0(t, t') H_I U(t', t_0) \right] \\ &= [H_I + H_0] U(t, t_0) = H U(t, t_0) \end{aligned} \quad (\text{A-11})$$

L'opérateur défini en (A-9) obéit donc bien à la relation (A-3) avec l'hamiltonien total H ; comme par ailleurs $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$, on vérifie ainsi que cet opérateur est l'opérateur d'évolution.

Si l'on reporte l'expression (A-9) de $U(t, t_0)$ dans l'intégrale du second membre de la même égalité (A-9), on obtient une expression de l'opérateur contenant une double intégrale en temps. Si l'on itère ce processus à plusieurs reprises, on obtient le développement de l'opérateur d'évolution en puissances de H_I :

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= U_0(t, t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' U_0(t, t') H_I U_0(t', t_0) \\ &\quad + \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' U_0(t, t') H_I U_0(t', t'') H_I U_0(t'', t_0) + \dots \end{aligned} \quad (\text{A-12})$$

Le terme d'ordre n de cette série consiste en une succession de $n + 1$ évolutions non perturbées, chacune décrite par U_0 , séparées par n interactions H_I .

L'opérateur d'évolution obéit à une autre équation intégrale, symétrique de (A-9), qui sera également utile pour la suite :

$$U(t, t_0) = U_0(t, t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' U(t, t') H_I U_0(t', t_0) \quad (\text{A-13})$$

Sa démonstration est analogue à celle de (A-9).

On peut enfin reporter dans l'intégrale de (A-9) l'expression (A-13) de U , en remplaçant t par t' et t' par t'' . On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= U_0(t, t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' U_0(t, t') H_I U_0(t', t_0) + \\ &\quad + \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' U_0(t, t') H_I U(t', t'') H_I U_0(t'', t_0) \end{aligned} \quad (\text{A-14})$$

A la différence de (A-12), le second membre de (A-14) ne contient que trois termes, et non une infinité. Cependant c'est l'opérateur d'évolution perturbé U , et non U_0 , qui apparaît dans le dernier terme du second membre de (A-14) entre les deux hamiltoniens d'interaction H_I . Cette autre forme de l'opérateur d'évolution nous sera utile au § E-2.

A-2. Point de vue d'interaction

Pour les calculs qui suivent, il sera souvent commode d'écrire l'équation de Schrödinger dans le point de vue d'interaction. Soit $|\psi(t)\rangle$ le vecteur d'état de Schrödinger. Si l'on pose :

$$|\bar{\psi}(t)\rangle = U_0^\dagger(t, t_0) |\psi(t)\rangle = \exp [i(t - t_0) H_0 / \hbar] |\psi(t)\rangle \quad (\text{A-15})$$

le nouveau vecteur d'état $|\bar{\psi}(t)\rangle$ obéit à l'équation d'évolution :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\bar{\psi}(t)\rangle = \bar{H}_I(t) |\bar{\psi}(t)\rangle \quad (\text{A-16})$$

où $\bar{H}_I(t)$ est défini par :

$$\bar{H}_I(t) = U_0^\dagger(t, t_0) H_I U_0(t, t_0) \quad (\text{A-17})$$

L'opérateur d'évolution $\bar{U}(t, t_0)$ en représentation d'interaction est celui qui donne l'évolution de $|\bar{\psi}(t)\rangle$:

$$|\bar{\psi}(t)\rangle = \bar{U}(t, t_0) |\bar{\psi}(t_0)\rangle \quad (\text{A-18})$$

Des équations (A-1) et (A-15), on peut déduire la relation entre opérateurs d'évolution dans les deux points de vue :

$$\bar{U}(t, t_0) = U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) = \exp[i(t - t_0) H_0/\hbar] U(t, t_0) \quad (\text{A-19})$$

D'autre part l'insertion de (A-18) dans (A-16) montre que :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \bar{U}(t, t_0) = \bar{H}_I(t) \bar{U}(t, t_0) \quad (\text{A-20})$$

qui conduit au développement suivant en série de $\bar{U}(t, t_0)$ (développement en perturbations) :

$$\bar{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \bar{H}_I(t') + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \bar{H}_I(t') \bar{H}_I(t'') + \dots \quad (\text{A-21})$$

L'avantage du point de vue d'interaction réside dans le fait que le vecteur d'état évolue uniquement sous l'effet de l'interaction – puisque $\bar{H}_I(t)$ est le seul opérateur apparaissant au second membre de (A-16). Nous verrons qu'il permet également d'exprimer les probabilités de transition en fonction des corrélations temporelles des opérateurs dipôle et champ, c'est-à-dire des valeurs moyennes de produits de grandeurs physiques prises à deux instants différents et évoluant librement (sous le seul effet de H_0). Enfin, si l'on désire calculer la probabilité de transition entre deux états propres $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ de H_0 , d'énergies respectives E_i et E_f , il s'avère souvent commode d'utiliser le point de vue d'interaction, puisque d'après (A-19) l'amplitude de transition prend la forme :

$$\langle \varphi_f | U(t, t_0) | \varphi_i \rangle = \langle \varphi_f | \exp[-i(t - t_0) H_0/\hbar] \bar{U}(t, t_0) | \varphi_i \rangle \quad (\text{A-22})$$

$$= e^{-iE_f(t-t_0)/\hbar} \langle \varphi_f | \bar{U}(t, t_0) | \varphi_i \rangle \quad (\text{A-23})$$

Comme le facteur de phase $e^{-iE_f(t-t_0)/\hbar}$ disparaît de la probabilité (module au carré de l'amplitude), il est possible de l'ignorer ; ceci permet de remplacer simplement l'opérateur d'évolution U par \bar{U} et d'utiliser directement le développement plus compact (A-21).

Dans tout ce chapitre et ses compléments, pour décrire l'interaction entre atome et champ, nous utiliserons l'hamiltonien dipolaire électrique $H_I = -\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{R})$

introduit au § C-4 du Chapitre XIX. En point de vue d'interaction¹, cet opérateur s'écrit :

$$\bar{H}_I(t) = -\bar{\mathbf{D}}(t) \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{R}, t) \quad (\text{A-24})$$

où :

$$\bar{\mathbf{D}}(t) = \exp(iH_0t/\hbar) \mathbf{D} \exp(-iH_0t/\hbar) \quad (\text{A-25a})$$

$$\bar{\mathbf{E}}_{\perp}(t) = \exp(iH_0t/\hbar) \mathbf{E}_{\perp} \exp(-iH_0t/\hbar) \quad (\text{A-25b})$$

A-3. Composante de fréquences positives et composante de fréquences négatives du champ

L'expression de l'opérateur champ électrique transverse est donnée par la relation (B-3) du Chapitre XIX (dans tout ce chapitre, nous supposons le système contenu dans une boîte de volume L^3). C'est une combinaison linéaire d'opérateurs d'annihilation a_i et de création a_i^{\dagger} , donc la somme :

$$\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{R}) = \mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}) + \mathbf{E}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}) \quad (\text{A-26})$$

de deux termes :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}) &= i \sum_i \left(\frac{\hbar\omega_i}{2\epsilon_0 L^3} \right)^{1/2} a_i \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}} \\ \mathbf{E}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}) &= -i \sum_i \left(\frac{\hbar\omega_i}{2\epsilon_0 L^3} \right)^{1/2} a_i^{\dagger} \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}} = \left[\mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}) \right]^{\dagger} \end{aligned} \quad (\text{A-27})$$

(L est la dimension de la cavité cubique dans laquelle le rayonnement est quantifié). L'opérateur $\mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R})$, obtenu en ne gardant que les opérateurs d'annihilation a_i dans le développement de $\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{R})$, est appelé² “composante de fréquences positives” du champ électrique. Quant à l'opérateur $\mathbf{E}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R})$, c'est la “composante de fréquences négatives”. Ces deux opérateurs ne sont pas hermitiques et ne commutent pas. Dans un produit d'opérateurs champ, on dit que l'ordre est *normal* si les opérateurs de création se trouvent à gauche des opérateurs d'annihilation, comme dans $\mathbf{E}_{\perp}^{(-)} \mathbf{E}_{\perp}^{(+)}$; on dit qu'il est *antinormal* pour un produit dans l'ordre inverse, comme $\mathbf{E}_{\perp}^{(+)} \mathbf{E}_{\perp}^{(-)}$.

En point de vue d'interaction, les opérateurs d'annihilation et de création deviennent :

$$\begin{aligned} \bar{a}_i(t) &= \exp(iH_0t/\hbar) a_i \exp(-iH_0t/\hbar) = a_i e^{-i\omega_i t} \\ \bar{a}_i^{\dagger}(t) &= \exp(iH_0t/\hbar) a_i^{\dagger} \exp(-iH_0t/\hbar) = a_i^{\dagger} e^{+i\omega_i t} \end{aligned} \quad (\text{A-28})$$

(on peut vérifier ces égalités en calculant les éléments de matrice dans la base des états de Fock, qui sont vecteurs propres de H_0 , et en utilisant le fait que l'opérateur

1. Nous traitons ici classiquement les degrés de liberté externes de l'atome. Celui-ci est supposé immobile au point \mathbf{R} , de sorte que \mathbf{R} n'est pas modifié quand on passe dans le point de vue d'interaction.

2. La composante de fréquences positives annihile donc un photon, la composante de fréquences négatives en crée un. De plus, en point de vue de Heisenberg, nous verrons que l'évolution libre de la première est en $e^{-i\omega t}$, celle de la seconde en $e^{+i\omega t}$. Cette dénomination de “fréquence positive” peut donc paraître quelque peu contre-intuitive, mais elle est consacrée par l'usage.

a_i a pour seul effet d'annihiler un photon dans le mode i). Les composantes de fréquences positives et négatives du champ sont donc :

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t) &= i \sum_i \left(\frac{\hbar\omega_i}{2\epsilon_0 L^3} \right)^{1/2} a_i \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R} - \omega_i t)} \\ \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t) &= -i \sum_i \left(\frac{\hbar\omega_i}{2\epsilon_0 L^3} \right)^{1/2} a_i^{\dagger} \boldsymbol{\varepsilon}_i e^{-i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R} - \omega_i t)} = \left[\bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t) \right]^{\dagger}\end{aligned}\quad (\text{A-29})$$

Supposons que l'on s'intéresse, à l'ordre le plus bas où ils apparaissent, à des processus d'absorption de photons par des atomes. Si l'on désire calculer l'action de $\bar{H}_I(t)$ sur l'état initial du système, on peut ne garder que les termes de $\bar{H}_I(t)$ qui annihilent un photon, c'est-à-dire les termes de l'hamiltonien contenant $\bar{a}_i(t)$. Ceci conduit à ne retenir dans l'opérateur champ que la composante de fréquences positives, et à utiliser l'hamiltonien d'interaction simplifié :

$$\bar{H}_I(t) \simeq -\bar{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t) \quad (\text{A-30})$$

De même, pour l'étude des processus d'émission de photons à l'ordre le plus bas, il est possible d'utiliser la forme :

$$\bar{H}_I(t) \simeq -\bar{\mathbf{D}}(t) \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t) \quad (\text{A-31})$$

B. Absorption de photons entre deux niveaux atomiques discrets

Nous traitons en premier lieu le cas d'un rayonnement monochromatique (§ B-1) et aborderons ensuite celui d'un rayonnement à large bande spectrale (§ B-2). Le calcul sera basé sur l'étude du taux de transition entre états stationnaires de l'hamiltonien non perturbé H_0 ; dans le Complément D_{XX}, nous présenterons une étude plus détaillée en termes de paquets d'ondes se propageant dans l'espace libre, construits par superposition cohérente d'états stationnaires.

B-1. Rayonnement monochromatique

B-1-a. Amplitude de probabilité d'absorption

Soient a et b les deux niveaux discrets d'énergies respectives E_a et E_b ; nous posons :

$$E_b - E_a = \hbar\omega_0 \quad (\text{B-1})$$

où $\omega_0/2\pi$ est la fréquence propre atomique, que nous supposons positive (l'énergie du niveau b est supérieure à celle du niveau a). Pour simplifier la discussion, nous ignorerons ici les variables externes, ce qui revient à traiter l'atome comme infiniment lourd et immobile³.

3. Dans le Complément A_{XIX}, nous montrons comment la prise en compte des variables externes et de la conservation de l'impulsion permet d'introduire l'effet Doppler et l'effet de recul dans l'absorption et l'émission d'un photon. Nous y montrons également comment le confinement de l'atome dans une région de l'espace par un potentiel de piégeage permet de contrôler ces effets.

Nous supposons que le rayonnement est, à l'instant initial t_i , dans un état $|\phi_{\text{in}}^R\rangle = |n_i\rangle$ contenant n_i photons i de vecteur d'onde \mathbf{k}_i , de polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ et de fréquence $\omega_i/2\pi$; il s'agit donc d'un rayonnement monochromatique. L'état initial du système atome + rayonnement est ainsi :

$$|\psi_{\text{in}}\rangle = |a; n_i\rangle \quad \text{d'énergie } E_{\text{in}} = E_a + n_i\hbar\omega_i \quad (\text{B-2})$$

Nous désirons calculer l'amplitude de probabilité pour que l'atome absorbe un photon et soit dans l'état excité b à l'instant t_f . L'état final du système est alors :

$$|\psi_{\text{fin}}\rangle = |b; n_i - 1\rangle \quad \text{d'énergie } E_{\text{fin}} = E_b + (n_i - 1)\hbar\omega_i. \quad (\text{B-3})$$

Comme nous l'avons noté plus haut, lorsque $|\psi_{\text{in}}\rangle$ et $|\psi_{\text{fin}}\rangle$ sont des états propres de H_0 , il est plus commode d'effectuer le calcul en représentation d'interaction. Dans le développement (A-21) de \bar{U} , le terme d'ordre le plus bas pouvant relier ces deux états est le terme d'ordre 1 en H_I . Appelons Δt la durée de l'interaction; l'amplitude de probabilité pour que le système, initialement dans l'état $|\psi_{\text{in}}\rangle$ à l'instant $t_0 = 0$, soit trouvé à l'instant final $t = \Delta t$ dans l'état $|\psi_{\text{fin}}\rangle$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle\psi_{\text{fin}}|\bar{U}(t_f, t_i)|\psi_{\text{in}}\rangle &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\Delta t} dt' \langle\psi_{\text{fin}}|e^{iH_0t'/\hbar} H_I e^{-iH_0t'/\hbar} |\psi_{\text{in}}\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle\psi_{\text{fin}}|H_I|\psi_{\text{in}}\rangle \int_0^{\Delta t} dt' e^{i(E_{\text{fin}} - E_{\text{in}})t'/\hbar} \end{aligned} \quad (\text{B-4})$$

soit, compte tenu de la relation $E_{\text{fin}} - E_{\text{in}} = \hbar(\omega_0 - \omega_i)$:

$$\begin{aligned} \langle\psi_{\text{fin}}|\bar{U}(\Delta t, 0)|\psi_{\text{in}}\rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle\psi_{\text{fin}}|H_I|\psi_{\text{in}}\rangle \int_0^{\Delta t} dt' e^{i(\omega_0 - \omega_i)t'} \\ &= -\langle\psi_{\text{fin}}|H_I|\psi_{\text{in}}\rangle \frac{1}{\hbar(\omega_0 - \omega_i)} \left[e^{i(\omega_0 - \omega_i)\Delta t} - 1 \right] \end{aligned} \quad (\text{B-5})$$

qui conduit à :

$$\langle\psi_{\text{fin}}|\bar{U}(\Delta t, 0)|\psi_{\text{in}}\rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle\psi_{\text{fin}}|H_I|\psi_{\text{in}}\rangle e^{i(\omega_0 - \omega_i)\Delta t/2} \left[\frac{2 \sin(\omega_0 - \omega_i) \Delta t/2}{(\omega_0 - \omega_i)} \right] \quad (\text{B-6})$$

La probabilité d'absorption est le module au carré de cette expression :

$$|\langle\psi_{\text{fin}}|\bar{U}(\Delta t, 0)|\psi_{\text{in}}\rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle\psi_{\text{fin}}|H_I|\psi_{\text{in}}\rangle|^2 \frac{4 \sin^2(\omega_0 - \omega_i) \Delta t/2}{(\omega_0 - \omega_i)^2} \quad (\text{B-7})$$

L'élément de matrice de H_I apparaissant dans l'amplitude (B-5) s'écrit, compte tenu des relations (A-24) et (A-27) :

$$\langle\psi_{\text{fin}}|H_I|\psi_{\text{in}}\rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_i}{2\epsilon_0 L^3}} \sqrt{n_i} \langle b|\boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{D}|a\rangle e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}} \quad (\text{B-8})$$

de sorte que la probabilité devient :

$$|\langle\psi_{\text{fin}}|\bar{U}(\Delta t, 0)|\psi_{\text{in}}\rangle|^2 = \frac{\omega_i}{2\hbar\epsilon_0 L^3} n_i |\langle b|\boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{D}|a\rangle|^2 \frac{4 \sin^2(\omega_0 - \omega_i) \Delta t/2}{(\omega_0 - \omega_i)^2} \quad (\text{B-9})$$

Elle est proportionnelle au nombre de photons excitateurs n_i , c'est-à-dire à l'intensité incidente dans l'état $|\psi_{\text{in}}\rangle$, ainsi qu'au carré du module de l'élément de matrice du dipôle atomique entre les états a et b (comme \mathbf{D} est un opérateur impair, l'absorption du photon ne peut relier que deux états de parités opposées). Cette probabilité est une fonction oscillante du temps d'observation Δt .

B-1-b. Conservation de l'énergie

La présence du facteur $(\omega_i - \omega_0)^2$ au dénominateur de (B-9) fait que la probabilité d'absorption peut prendre des valeurs d'autant plus grandes que ω_i est plus proche de ω_0 . On dit que l'absorption d'un photon est résonnante lorsque l'énergie du photon absorbé est exactement égale à l'énergie que doit gagner l'atome pour passer de a à b (conservation de l'énergie). La largeur en fréquence de la résonance décrite par (B-9) est de l'ordre de $\Delta\omega_i = 1/\Delta t$, c'est-à-dire en énergie de l'ordre de $\Delta E = \hbar/\Delta t$. Ceci est compatible avec la relation d'incertitude temps-énergie : pour un processus s'étendant sur une durée de l'ordre de Δt , l'énergie n'est conservée qu'à $\hbar/\Delta t$ près.

En fait, si l'on fait varier la fréquence angulaire ω_i , on peut considérer la fonction entre crochets dans (B-6) comme une fonction delta approchée $\delta^{(\Delta t)}(\omega_0 - \omega_i)$, ayant une largeur non nulle de l'ordre de $1/\Delta t$. Comme la relation (10) de l'Appendice II du tome II indique que l'intégrale sur ω_i de $\sin[(\omega_0 - \omega_i)\Delta t/2]/(\omega_0 - \omega_i)$ est égale à π , et comme $(\omega_0 - \omega_i)$ est proportionnel à la variation d'énergie totale entre l'état final et l'état initial, l'équation (B-6) peut s'écrire (en ignorant le facteur de phase) :

$$\langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(\Delta t, 0) | \psi_{\text{fin}} \rangle \simeq -2i\pi \langle \psi_{\text{fin}} | H_I | \psi_{\text{in}} \rangle \delta^{(\Delta t)}(E_{\text{fin}} - E_{\text{in}}) \quad (\text{B-10})$$

B-1-c. Limites du traitement perturbatif

Le traitement perturbatif à l'ordre le plus bas en H_I que nous avons utilisé ne peut pas rester valable pour des temps arbitrairement grands. Pour le voir, supposons par exemple que la condition de résonance $\omega_i = \omega_0$ soit satisfaite. Comme $\sin(x\Delta t)/x$ tend vers Δt quand x tend vers 0, la probabilité d'absorption prévue par (B-9) est alors proportionnelle à Δt^2 , qui croît rapidement avec Δt lorsque cet intervalle de temps augmente. Mais une probabilité ne peut jamais dépasser l'unité ; il est donc clair que l'expression (B-9) ne peut rester valable pour les temps longs. La même remarque s'applique si ω_i est proche de ω_0 sans lui être strictement égal : il est parfaitement possible que l'amplitude d'oscillation du second membre de (B-9) excède encore l'unité dans ce cas. Il faut donc limiter l'utilisation des résultats précédents à des temps suffisamment courts pour que le traitement de perturbations qui les a fournis reste valable.

Nous utiliserons dans le Complément C_{XX} la "méthode de l'atome habillé" pour obtenir un traitement plus précis des effets du couplage entre un atome à deux niveaux et un mode unique du champ. L'intensité de ce couplage sera caractérisée par une constante Ω_1 appelée "fréquence de Rabi". A résonance, on prédit alors une "oscillation de Rabi" en $\sin \Omega_1 \Delta t$ de l'amplitude de probabilité⁴. Le comportement quadratique en Δt^2 trouvé ici pour la probabilité d'absorption à résonance n'est autre que le premier terme du développement de $\sin^2(\Omega_1 \Delta t)$ en puissances de $\Omega_1 \Delta t$. Nous discuterons également dans quelle mesure la relation (B-9) reste correcte loin de résonance.

4. Nous verrons également comment cette oscillation de Rabi est modifiée lorsqu'on tient compte de la largeur du niveau excité due à l'émission spontanée.

B-2. Rayonnement non monochromatique

Nous étudions maintenant les processus d'absorption et d'émission dans le cas où le rayonnement n'est pas monochromatique. Nous supposons que les transitions s'effectuent entre deux niveaux atomiques discrets a et b ; le cas d'un continuum de niveaux atomiques est traité dans le Complément B_{XX}.

B-2-a. Absorption d'un rayonnement à large bande

L'état initial du système atome + rayonnement est maintenant supposé de la forme :

$$|\psi_{\text{in}}\rangle = |a; \phi_{\text{in}}^R\rangle \quad (\text{B-11})$$

L'atome est encore dans l'état d'énergie interne inférieure a , mais le rayonnement est cette fois dans un état $|\phi_{\text{in}}^R\rangle$ où plusieurs modes de fréquences différentes contiennent des photons. Le rayonnement possède donc une répartition de fréquences caractérisée par une certaine bande spectrale $\Delta\omega$. Nous verrons plus loin (dernières lignes du § B-2-a- γ) à quelle condition doit satisfaire $\Delta\omega$ pour que les résultats obtenus dans cette section soient valables. Nous menons le calcul de la même façon qu'au § B-1, tout en mettant plus l'accent sur les propriétés de corrélation temporelles du champ incident.

Introduisons la notation :

$$\langle b | \mathcal{D} | a \rangle = \mathcal{D} \quad \text{avec :} \quad \mathcal{D} = \mathcal{D} \mathbf{e}_d \quad (\text{B-12})$$

où \mathbf{e}_d est le vecteur unitaire⁵ (a priori complexe) parallèle à \mathcal{D} , et \mathcal{D} le module (réel) de ce vecteur. En point de vue d'interaction, cette égalité devient :

$$\langle b | \bar{\mathcal{D}}(t) | a \rangle = \langle b | e^{iH_0 t} \mathcal{D} e^{-iH_0 t} | a \rangle = \mathcal{D} e^{i\omega_0 t} \quad (\text{B-13})$$

α . Probabilité de transition

Reportons l'expression (A-24) de $\bar{H}_I(t)$ dans (A-21). Le terme du premier ordre en $\bar{H}_I(t)$ fournit l'amplitude de probabilité pour que le système, partant à $t_i = 0$ de l'état $|a; \phi_{\text{in}}^R\rangle$, aboutisse à l'instant $t_f = \Delta t$ dans l'état $|b; \phi_{\text{fin}}^R\rangle$. Compte tenu de (B-13), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(t_f, t_i) | \psi_{\text{in}} \rangle &= -\frac{1}{i\hbar} \int_0^{\Delta t} dt' \langle b | \bar{\mathcal{D}}(t') | a \rangle \cdot \langle \phi_{\text{fin}}^R | \bar{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \\ &= -\frac{\mathcal{D}}{i\hbar} \int_0^{\Delta t} dt' e^{i\omega_0 t'} \langle \phi_{\text{fin}}^R | E_{\mathbf{d}}^{(+)}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \end{aligned} \quad (\text{B-14})$$

où nous n'avons retenu que la composante de fréquences positives du champ, qui seule intervient puisque $|\phi_{\text{fin}}^R\rangle$ contient moins de photons que $|\phi_{\text{in}}^R\rangle$ (il s'agit d'un processus d'absorption par l'atome) ; dans cette égalité et les suivantes, nous utilisons la notation commode :

$$E_{\mathbf{d}}^{(+)}(\mathbf{R}, t) = \mathbf{e}_d \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t) \quad ; \quad E_{\mathbf{d}^*}^{(-)}(\mathbf{R}, t) = \mathbf{e}_d^* \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t) \quad (\text{B-15})$$

5. Les éléments de matrice $\mathcal{D}_{x,y,z}$ des trois composantes de \mathcal{D} sont trois nombres a priori complexes. On pose $\mathcal{D} = \sqrt{\mathcal{D}_x^2 + \mathcal{D}_y^2 + \mathcal{D}_z^2}$ et l'on introduit le vecteur $\mathbf{e}_d = \mathcal{D}/\mathcal{D}$; c'est un vecteur unitaire car $\mathbf{e}_d^* \cdot \mathbf{e}_d = 1$.

(l'atome est supposé fixe au point \mathbf{R}). La probabilité de transition correspondante $P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t)$ est obtenue en prenant le carré du module de l'amplitude (B-14), puis en sommant sur tous les états finals possibles du rayonnement. En remplaçant la variable d'intégration t' par t'' dans (B-14), on obtient ainsi :

$$P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t) = \frac{\mathcal{D}^2}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{\Delta t} dt'' e^{i\omega_0(t''-t')} G_R^N(t', t'') \quad (\text{B-16})$$

où $G_R^N(t', t'')$ est défini par :

$$\begin{aligned} G_R^N(t', t'') &= \sum_{|\phi_{\text{fin}}^R\rangle} \langle \phi_{\text{fin}}^R | E_{\mathbf{d}^*}^{(-)}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{fin}}^R \rangle \langle \phi_{\text{fin}}^R | E_{\mathbf{d}}^{(+)}(\mathbf{R}, t'') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \\ &= \langle \phi_{\text{in}}^R | E_{\mathbf{d}^*}^{(-)}(\mathbf{R}, t') E_{\mathbf{d}}^{(+)}(\mathbf{R}, t'') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \end{aligned} \quad (\text{B-17})$$

Cette fonction caractérise l'effet du faisceau incident dans le processus physique d'absorption considéré. Elle est la valeur moyenne dans l'état initial du produit de deux opérateurs champ, rangés dans l'ordre normal (§ A-3), et pris à deux instants différents.

Si nous changeons la variable d'intégration t'' en $\tau = t'' - t'$, l'équation (B-16) devient :

$$P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t) = \frac{\mathcal{D}^2}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \int_{-t'}^{\Delta t - t'} d\tau e^{i\omega_0\tau} G_R^N(t', t' + \tau) \quad (\text{B-18})$$

La probabilité de transition est donc proportionnelle à l'intégrale sur le temps de la transformée de Fourier par rapport à τ de la fonction $G_R^N(t', t' + \tau)$, restreinte entre les temps $-t'$ et $\Delta t - t'$.

\beta. Spectre d'excitation

Si l'état initial du rayonnement $|\phi_{\text{in}}^R\rangle$ est un état propre du rayonnement libre, la fonction $G_R^N(t', t'')$ ne dépend que de la différence $t' - t''$. Par exemple, si $|\phi_{\text{in}}^R\rangle$ est un état de Fock⁶ :

$$|\phi_{\text{in}}^R\rangle = |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (\text{B-19})$$

où tous les modes peuplés ont la même polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}_i$, l'insertion des développements (A-29) des opérateurs champ conduit à :

$$\begin{aligned} G_R^N(t' - t'') &= \sum_i \frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3} \underbrace{\langle \phi_{\text{in}}^R | a_i^\dagger a_i | \phi_{\text{in}}^R \rangle}_{=\langle n_i \rangle} |\mathbf{e}_d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_i|^2 e^{i\omega_i(t' - t'')} \\ &= \int d\omega I_R^N(\omega) e^{i\omega(t' - t'')} \end{aligned} \quad (\text{B-20})$$

où :

$$I_R^N(\omega) = \sum_i \frac{\langle n_i \rangle \hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3} |\mathbf{e}_d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_i|^2 \delta(\omega_i - \omega) \quad (\text{B-21})$$

6. Au lieu d'un état initial de Fock, on pourrait prendre un mélange statistique de tels états avec des poids arbitraires, mais cela ne changerait pas l'essentiel des calculs et résultats qui suivent.

Si le rayonnement se trouve initialement dans l'état de Fock (B-19), la valeur de $\langle n_i \rangle$ est simplement le nombre n_i de photons dans cet état ; mais si le rayonnement se trouve dans un mélange statistique de tels états (cf. note 6), $\langle n_i \rangle$ désigne la moyenne statistique correspondante.

L'expression (B-20) apparaît donc comme la valeur en $t' - t''$ de la transformée de Fourier d'une fonction $I_R^N(\omega)$ de ω qui dépend des populations initiales de photons $\langle n_i \rangle$. Puisque $\langle n_i \rangle \hbar \omega_i$ est l'énergie moyenne du mode i de fréquence $\omega_i/2\pi$, la fonction $I_R^N(\omega)$ représente la variation avec ω de la densité d'énergie du rayonnement, soit encore la distribution spectrale du rayonnement incident (spectre d'excitation). A priori, ses variations sont quelconques, mais il arrive souvent que la densité d'énergie présente un pic de largeur $\Delta\omega$, sans autre structure particulière. Sa transformée de Fourier $G_R^N(t' - t'')$ est alors une fonction de largeur $\simeq 1/\Delta\omega$; il en découle que, lorsque $|t' - t''|$ devient grand devant $1/\Delta\omega$, la fonction de corrélation $G_R^N(t' - t'')$ tend vers 0 et devient négligeable. Nous allons voir que, dans ce cas, la probabilité devient proportionnelle à Δt , ce qui permet d'introduire naturellement une probabilité par unité de temps.

γ . Probabilité par unité de temps

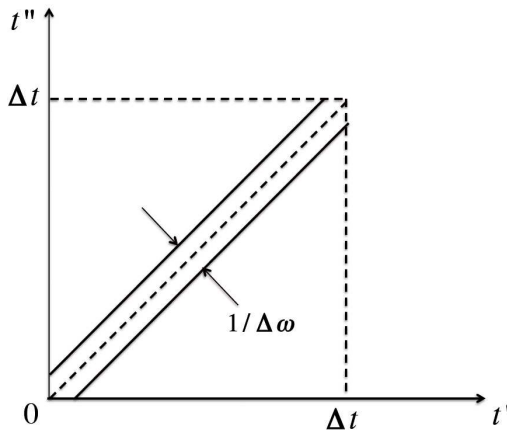


FIGURE 1 – La fonction à intégrer dans l'expression (B-16) de la probabilité d'absorption n'est appréciable que dans une bande de largeur $1/\Delta\omega$ autour de la première bissectrice, où $\Delta\omega$ est la largeur du spectre du rayonnement incident. Si $\Delta t \gg 1/\Delta\omega$, on voit donc que l'aire du domaine contribuant à l'intégrale croît proportionnellement à la longueur de la diagonale du carré, donc à Δt (et non à son carré).

Le domaine d'intégration de l'intégrale double de (B-16) est représenté sur la Figure 1 ; comme $G_R^N(t' - t'')$ s'annule dès que $|t' - t''|$ devient grand devant $1/\Delta\omega$, la portion du domaine où la fonction à intégrer n'est pas négligeable est une bande de largeur $1/\Delta\omega$ centrée sur la première bissectrice ; la largeur de cette bande est très petite devant celle du domaine entier si $\Delta t \gg 1/\Delta\omega$. Pour utiliser cette propriété, remplaçons comme plus haut la variable d'intégration t'' par $\tau = t' - t''$ (le jacobien

associé dans l'intégrale double à ce changement de variable vaut 1) :

$$\int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{\Delta t} dt'' = \int_0^{\Delta t} dt' \int_{-t'}^{\Delta t - t'} d\tau \quad (\text{B-22})$$

Dans la seconde intégrale, les valeurs de τ qui contribuent sont de l'ordre du temps de corrélation $1/\Delta\omega$ de $G_R^N(t' - t'')$. Si nous supposons $\Delta t \gg 1/\Delta\omega$, nous pouvons remplacer les deux bornes de cette seconde intégrale par $-\infty$ et $+\infty$. Le report dans (B-18) de (B-20) fait alors apparaître l'intégrale :

$$\int_0^{\Delta t} dt' \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i(\omega_0 - \omega)\tau} I_R^N(\omega) = 2\pi \Delta t I_R^N(\omega_0) \quad (\text{B-23})$$

car la somme sur $d\tau$ introduit une fonction $2\pi\delta(\omega_0 - \omega)$, ce qui permet d'effectuer l'intégration sur $d\omega$; on obtient finalement une fonction indépendante de t' dont l'intégrale donne Δt .

On trouve alors :

$$P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \Delta t \mathcal{D}^2 I_R^N(\omega_0) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \Delta t \mathcal{D}^2 \sum_i \frac{\langle n_i \rangle \hbar \omega_i}{2\varepsilon_0 L^3} |\mathbf{e}_d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_i|^2 \delta(\omega_i - \omega_0) \quad (\text{B-24})$$

Ainsi, $P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t)$ croît **linéairement** avec Δt , ce qui permet de définir une probabilité d'absorption par unité de temps (taux d'absorption) :

$$W_{a \rightarrow b}^{\text{abs}} = \frac{P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t)}{\Delta t} = 2\pi \frac{\mathcal{D}^2}{\hbar^2} I_R^N(\omega_0) \quad (\text{B-25})$$

(rappelons que, pour un rayonnement monochromatique, nous avons trouvé que la croissance n'est pas linéaire en Δt , mais quadratique). Ce taux d'absorption est proportionnel à la densité d'énergie du rayonnement prise à la fréquence ω_0 de la transition atomique. Les formules (B-21) et (B-25) donnent la dépendance du taux d'absorption en fonction des divers paramètres du rayonnement incident (population des modes, polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}_i$).

Le calcul précédent est perturbatif, puisqu'il est mené à l'ordre le plus bas en H_I . Il n'est donc valable que pour des temps Δt tels que $P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t) = W_{a \rightarrow b}^{\text{abs}} \Delta t \ll 1$, c'est-à-dire tels que $\Delta t \ll 1/W_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}$. Par ailleurs, nous avons vu plus haut que la variation linéaire de $P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t)$ avec Δt n'était obtenue que si $\Delta t \gg 1/\Delta\omega$. Ces deux inégalités ne sont compatibles que si $\Delta\omega \gg W_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}$. Pour que l'approximation d'ordre le plus bas soit valable, le rayonnement de bande large doit donc avoir une largeur spectrale grande devant le taux d'absorption.

δ . Cas particulier d'un rayonnement isotrope

Les calculs précédents peuvent être poussés plus loin si le rayonnement est isotrope, c'est-à-dire si le nombre moyen $\langle n_i \rangle$ de photons dans le mode i ne dépend que de ω_i , mais pas de la direction du vecteur d'onde \mathbf{k}_i ou de la polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}_i$. Les résultats obtenus dans ce cas seront utiles pour les calculs effectués plus loin (§ C-4) concernant le taux d'émission spontanée, ainsi que pour le rayonnement isotrope en équilibre thermodynamique.

Considérons la limite de (B-25) lorsque le volume L^3 dans lequel le système est contenu tend vers l'infini. La somme sur l'indice i peut alors être approximée par une intégrale :

$$\sum_i \Rightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int k^2 dk d\Omega \sum_{\varepsilon \perp \mathbf{k}} \quad (\text{B-26})$$

Commençons par calculer, pour une direction donnée de \mathbf{k} , la somme des quantités ε_{iz}^2 sur les deux polarisations perpendiculaires à \mathbf{k} . Choisissons deux vecteurs polarisation, ε_1 et ε_2 , perpendiculaires entre eux et tous deux perpendiculaires à \mathbf{k} ; le premier dans le plan contenant l'axe z et \mathbf{k} , avec $\varepsilon_{1z} = \sin\theta$, où θ est l'angle entre l'axe z et \mathbf{k} ; le second est perpendiculaire à ce plan, avec $\varepsilon_{2z} = 0$. On a donc $\sum_{\varepsilon \perp \mathbf{k}} \varepsilon_{iz}^2 = \sin^2\theta$. L'intégrale sur les directions de \mathbf{k} est alors immédiate :

$$\int d\Omega \sin^2\theta = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin^3\theta = \frac{8\pi}{3} \quad (\text{B-27})$$

Ne reste plus que l'intégrale sur le module k de \mathbf{k} . En utilisant (B-25), (B-26), (B-27) et en passant de la variable k à la variable $\omega = ck$, on obtient finalement :

$$W_{a \rightarrow b}^{\text{abs}} = \frac{\mathcal{D}^2 \omega_0^3}{3\varepsilon_0 \hbar \pi c^3} \langle n(\omega_0) \rangle \quad (\text{B-28})$$

C. Processus d'émission induite et d'émission spontanée

C-1. Taux d'émission

Nous supposons maintenant que l'atome est initialement dans l'état supérieur b , le rayonnement étant dans l'état de Fock initial (B-19), et nous étudions les processus d'émission où l'atome retombe dans l'état a en émettant un photon. Les calculs sont analogues à ceux que nous avons effectués pour le processus d'absorption, mais avec un certain nombre de différences. En premier lieu, il faut maintenant prendre la forme (A-31) de l'hamiltonien d'interaction, celle qui contient la composante de fréquences négatives de l'opérateur champ (avec uniquement des opérateurs de création). Ensuite, pour l'opérateur dipôle électrique, il ne faut garder que le terme faisant passer de b à a , ce qui conduit à remplacer (B-13) par l'expression complexe conjuguée :

$$\langle a | \tilde{\mathcal{D}}(t) | b \rangle = \mathcal{D} e^{-i\omega_0 t} = \mathcal{D} \mathbf{e}_d^* e^{-i\omega_0 t} \quad (\text{C-1})$$

La fonction de corrélation (B-17) du champ dans l'ordre normal est alors remplacée par la fonction de corrélation dans l'ordre anti-normal $G_R^A(t', t'')$:

$$G_R^A(t', t'') = \langle \phi_{\text{in}}^R | E_{\mathbf{d}}^{(+)}(\mathbf{R}, t') E_{\mathbf{d}^*}^{(-)}(\mathbf{R}, t'') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \quad (\text{C-2})$$

Pour l'état du rayonnement (B-19), cette fonction est donnée par :

$$\begin{aligned} G_R^A(t' - t'') &= \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2\varepsilon_0 L^3} \langle n_i | a_i a_i^\dagger | n_i \rangle |\mathbf{e}_d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_i|^2 e^{-i\omega_i(t' - t'')} \\ &= \sum_i \frac{(\langle n_i \rangle + 1) \hbar \omega_i}{2\varepsilon_0 L^3} |\mathbf{e}_d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_i|^2 e^{-i\omega_i(t' - t'')} \end{aligned} \quad (\text{C-3})$$

Ici, c'est $a_i a_i^\dagger$ qui intervient dans (C-3), et non $a_i^\dagger a_i$ comme dans (B-20). Comme a_i et a_i^\dagger ne commutent pas, il apparaît une différence importante avec l'expression (B-20) de $G_R^N(t' - t'')$: le nombre $\langle n_i \rangle$ de photons occupant initialement le mode i est remplacé par $\langle n_i \rangle + 1$. C'est le caractère quantique du champ (non-commutation des opérateurs) qui est responsable de ces différences essentielles entre processus d'absorption et d'émission.

Le taux d'émission s'obtient par des calculs semblables à ceux qui conduisent à l'expression (B-25) du taux d'absorption (avec changement de signe de ω_0 et des ω_i). On aboutit à :

$$W_{b \rightarrow a}^{\text{em}} = \frac{P_{b \rightarrow a}^{\text{em}}(\Delta t)}{\Delta t} = 2\pi \frac{\mathcal{D}^2}{\hbar^2} \sum_i \frac{[\langle n_i \rangle + 1] \hbar \omega_i}{2\varepsilon_0 L^3} |\mathbf{e}_d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_i|^2 \delta(\omega_i - \omega_0) \quad (\text{C-4})$$

Ce résultat ne diffère de celui du taux d'absorption que par le remplacement de $\langle n_i \rangle$ par $\langle n_i \rangle + 1$. Cette formule donne l'expression générale du taux d'émission en fonction de la population $\langle n_i \rangle$ des modes et de leur polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}_i$. Nous discutons maintenant successivement ses deux composantes, celle qui est proportionnelle à $\langle n_i \rangle$, puis celle qui n'en dépend pas.

C-2. Emission induite

Commençons par considérer les termes de (C-4) qui contiennent $\langle n_i \rangle$, c'est-à-dire la contribution des modes contenant initialement au moins un photon. Ces termes correspondent à une émission qui est provoquée par le rayonnement incident ; leur taux est proportionnel à l'intensité lumineuse incidente. Elle est pour cette raison appelée émission *induite*, ou encore *stimulée*. Son taux est identique au taux d'absorption, puisque les termes dépendant de $\langle n_i \rangle$ sont les mêmes dans (B-24) et (C-4) :

$$W_{b \rightarrow a}^{\text{em.ind.}} = W_{a \rightarrow b}^{\text{abs}} \quad (\text{C-5})$$

En particulier, si le rayonnement est isotrope, on obtient un résultat identique à (B-28) :

$$W_{b \rightarrow a}^{\text{em.ind.}} = \frac{\mathcal{D}^2 \omega_0^3}{3\varepsilon_0 \hbar \pi c^3} \langle n(\omega_0) \rangle \quad (\text{C-6})$$

Un photon apparaissant par émission induite est créé dans le même mode i que celui des photons qui induisent cette émission : le nombre de photons n_i dans ce mode passe de n_i à $n_i + 1$. Le photon supplémentaire a donc même énergie, même direction et même polarisation que ces n_i photons. Si le rayonnement incident est cohérent, on peut également montrer que le rayonnement émis de manière stimulée a la même phase que celui qui lui donne naissance. Il en résulte un effet d'interférence constructive (dans la direction du rayonnement incident) entre rayonnement diffusé par le dipôle induit et rayonnement incident, et donc un effet d'amplification. Pour que ce phénomène se produise, il faut toutefois que les populations du milieu atomique soient inversées, c'est-à-dire que la probabilité d'occupation du niveau supérieur b soit supérieure à celle du niveau a . En revanche, si elle est inférieure, l'interférence est destructive ; c'est ce qui explique l'atténuation d'un faisceau incident par absorption. L'amplification cohérente par émission induite d'un faisceau incident

se propageant dans un milieu atomique dont les populations sont inversées joue un rôle essentiel dans le fonctionnement des lasers. Le mot laser est un acronyme pour “*Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*”.

C-3. Emission spontanée

Si tous les $\langle n_i \rangle$ sont nuls, c’est que le champ est initialement dans l’état du vide ; le taux d’absorption (B-25) est alors nul. Par contre, le taux d’émission (C-4) ne l’est pas, à cause de la présence du terme 1 dans $\langle n_i | a_i a_i^\dagger | n_i \rangle = \langle n_i \rangle + 1$. Il en découle qu’un atome se trouvant dans l’état supérieur b , lorsqu’il est placé dans le vide de photons, a une probabilité non nulle par unité de temps d’émettre un photon en retombant dans le niveau inférieur a . C’est le processus d’émission spontanée.

Le terme 1 apparaissant dans (C-4) est le même pour tous les modes, à la différence du terme $\langle n_i \rangle$ qui n’existe que pour les modes contenant des photons. Comme ce terme 1 ne privilégie aucune direction ni aucune polarisation, la situation est analogue à celle d’un rayonnement isotrope ; les calculs qui démontrent (B-28) demeurent valables, à condition de remplacer $\langle n(\omega_0) \rangle$ par 1. On obtient ainsi l’expression du taux d’émission spontanée :

$$W_{b \rightarrow a}^{\text{em.spont.}} = \frac{\mathcal{D}^2 \omega_0^3}{3\varepsilon_0 \hbar \pi c^3} \quad (\text{C-7})$$

Ce résultat pourrait également être obtenu par la règle d’or de Fermi (Chapitre XIII, § C-3-b) de la façon suivante. Le système atome + rayonnement part de l’état initial $|b; 0\rangle$ (atome dans l’état b , vide de photons). Cet état discret est couplé à une infinité d’états finals $|a; 1_i\rangle$, atome dans l’état a avec un photon dans le mode i . L’application de la règle d’or permet alors de calculer la probabilité par unité de temps de la transition de l’état discret initial vers le continuum d’états finals, qui n’est autre que le taux d’émission spontanée :

$$W_{b \rightarrow a}^{\text{em.spont.}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i |\langle a; 1_i | H_I | b; 0_i \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_i - \hbar\omega_0) \quad (\text{C-8})$$

En utilisant $\langle a; 1_i | H_I | b; 0_i \rangle = i\mathcal{D}(\mathbf{e}_d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_i)(\hbar\omega_i/2\varepsilon_0 L^3)^{1/2}$ ainsi que les équations (B-26) et (B-27), on retrouve le résultat (C-7).

Cette équation indique que le taux d’émission spontanée croît comme le cube de la fréquence de la transition atomique ; ceci explique pourquoi l’émission spontanée, négligeable dans le domaine des radiofréquences, devient importante dans le domaine optique, et plus encore dans le domaine de l’ultraviolet ou des rayons X. Ce facteur ω^3 a deux origines : d’une part le carré du facteur $\omega^{1/2}$ apparaissant dans l’expression du champ électrique, d’autre part le facteur ω^2 apparaissant dans la densité d’états finals.

Le taux d’émission spontanée $W_{b \rightarrow a}^{\text{em.spont.}}$ est également appelé “*largeur naturelle*” du niveau excité b et noté Γ . L’inverse de Γ est la “*durée de vie radiative*” de l’état excité, c’est-à-dire le temps moyen au bout duquel l’atome se désexcite radiativement :

$$\Gamma = W_{b \rightarrow a}^{\text{em.spont.}} = \frac{1}{\tau_R} \quad (\text{C-9})$$

Il est intéressant de comparer le taux $W_{b \rightarrow a}^{\text{em.spont.}}$ à ω_0 . On déduit de (C-7) que :

$$\frac{\Gamma}{\omega_0} = \frac{\mathcal{D}^2 \omega_0^2}{3\varepsilon_0 \hbar \pi c^3} \quad (\text{C-10})$$

Le dipôle \mathcal{D} est de l'ordre de qa_0 où q est la charge de l'électron et a_0 le rayon de Bohr. On voit apparaître la quantité $q^2/(3\pi\varepsilon_0\hbar c)$ qui, au facteur $4/3$ près, n'est autre que la constante de structure fine $\alpha \simeq 1/137$ multipliée par $a_0^2\omega_0^2/c^2$. Comme $a_0\omega_0$ est de l'ordre de la vitesse de l'électron sur la première orbite de Bohr, α fois plus petite que la vitesse c de la lumière, $a_0^2\omega_0^2/c^2$ est de l'ordre de α^2 , de sorte que finalement :

$$\frac{\Gamma}{\omega_0} \simeq \alpha^3 \quad (\text{C-11})$$

La largeur naturelle du niveau excité est donc très petite devant la fréquence de la transition atomique : un très grand nombre d'oscillations du dipôle atomique peuvent se produire avant que ces oscillations ne soient amorties. Typiquement, dans le domaine optique, Γ est de l'ordre de 10^7 à 10^9 s⁻¹ alors que ω_0 est bien plus élevé, de l'ordre de 10^{14} à 10^{15} s⁻¹.

C-4. Coefficients d'Einstein et loi de Planck

Supposons maintenant que le rayonnement soit dans un état d'équilibre thermodynamique à la température T (rayonnement du corps noir). Dans ce cas, il est courant d'utiliser d'autres notations pour les divers taux d'absorption et d'émission induite et spontanée que nous avons calculés : les coefficients A et B d'Einstein dans son article de 1917. Dans cet article, il introduit pour la première fois la notion d'émission stimulée :

$$W_{a \rightarrow b}^{\text{abs}} = B_{a \rightarrow b} \quad W_{b \rightarrow a}^{\text{em.ind.}} = B_{b \rightarrow a} \quad W_{b \rightarrow a}^{\text{em.spont.}} = A_{b \rightarrow a} \quad (\text{C-12})$$

Ecrivons les équations d'évolution des populations σ_{bb} et σ_{aa} des niveaux b et a sous l'effet des divers processus d'absorption et d'émission qu'ils subissent :

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{bb} &= B_{a \rightarrow b} \sigma_{aa} - B_{b \rightarrow a} \sigma_{bb} - A_{b \rightarrow a} \sigma_{bb} \\ \dot{\sigma}_{aa} &= -B_{a \rightarrow b} \sigma_{aa} + B_{b \rightarrow a} \sigma_{bb} + A_{b \rightarrow a} \sigma_{bb} \end{aligned} \quad (\text{C-13})$$

Par exemple, dans le second membre de la première ligne de (C-13), le premier terme décrit comment le niveau b se remplit par absorption d'un photon à partir de a , le second comment il se vide par émission induite vers a , le troisième comment il se vide par émission spontanée. Des considérations analogues peuvent être faites à propos de la seconde ligne.

En régime stationnaire, c'est-à-dire à l'équilibre entre ces processus, on a :

$$\dot{\sigma}_{aa} = \dot{\sigma}_{bb} = 0 \quad (\text{C-14})$$

et la première équation donne :

$$\sigma_{bb} = \frac{B_{a \rightarrow b}}{B_{b \rightarrow a} + A_{b \rightarrow a}} \sigma_{aa} \quad (\text{C-15})$$

Or, d'après la loi de Maxwell-Boltzmann, σ_{bb}/σ_{aa} doit être égal à $e^{-(\hbar\omega_0/k_B T)}$. On en déduit que les populations σ_{bb} et σ_{aa} doivent, à l'équilibre, obéir à la relation :

$$\frac{\sigma_{bb}}{\sigma_{aa}} = e^{-(\hbar\omega_0/k_B T)} = \frac{B_{a \rightarrow b}}{B_{b \rightarrow a} + A_{b \rightarrow a}} = \frac{\langle n(\omega_0) \rangle}{\langle n(\omega_0) \rangle + 1} \quad (\text{C-16})$$

et que par suite :

$$\langle n(\omega_0) \rangle = \frac{e^{-(\hbar\omega_0/k_B T)}}{1 - e^{-(\hbar\omega_0/k_B T)}} = \frac{1}{e^{(\hbar\omega_0/k_B T)} - 1} \quad (\text{C-17})$$

Si l'on multiplie l'énergie moyenne par mode $\hbar\omega_0 \langle n(\omega_0) \rangle$ par la densité de modes $8\pi\nu_0^2/c^3$ au voisinage de ω_0 , on retrouve la loi de Planck pour la densité d'énergie par unité de volume du rayonnement du corps noir en termes de fréquences $\nu_0 = \omega_0/2\pi$:

$$u(\nu_0) = \frac{8\pi h \nu_0^3}{c^3} \frac{1}{e^{(h\nu_0/k_B T)} - 1} \quad (\text{C-18})$$

Ainsi, lorsqu'un rayonnement conduit un ensemble d'atomes à deux niveaux vers l'équilibre de Maxwell-Boltzmann par les processus d'absorption et d'émission induite et spontanée, ce rayonnement doit nécessairement obéir à la loi de Planck. C'est l'esprit même de la méthode suivie par Einstein pour établir cette loi⁷.

D. Rôle des fonctions de corrélation dans les processus à un photon

Les probabilités associées à des processus à un photon s'expriment de façon générale à partir des fonctions de corrélation de l'atome et du champ.

D-1. Processus d'absorption

Ecrivons à nouveau l'amplitude de probabilité pour que le système, partant à $t_i = 0$ de l'état $|a; \phi_{\text{in}}^R\rangle$, aboutisse à l'instant $t_f = \Delta t$ dans l'état $|b; \phi_{\text{fin}}^R\rangle$ par une transition à un photon – cf. (B-14) :

$$\langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(\Delta t, 0) | \psi_{\text{in}} \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \int_0^{\Delta t} dt' \langle b | \bar{D}(t') | a \rangle \cdot \langle \phi_{\text{fin}}^R | \bar{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \quad (\text{D-1})$$

Pour un processus d'absorption du rayonnement par l'atome, le nombre de photons dans l'état final $|\phi_{\text{fin}}^R\rangle$ est plus faible que dans l'état initial $|\phi_{\text{in}}^R\rangle$; seule la composante du champ de fréquence positive $\bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}$, qui peut détruire des photons, donne une contribution à l'élément de matrice $\langle \phi_{\text{fin}}^R | \bar{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{in}}^R \rangle$. Commençons par supposer que l'état initial du rayonnement ne contient que des photons d'une seule polarisation donnée ϵ_{in} , de sorte que seuls les modes ayant cette polarisation interviennent dans l'élément de matrice. Nous avons alors :

7. Einstein ne disposait cependant pas en 1917 de la théorie quantique du rayonnement, de sorte que son introduction heuristique des coefficients A et B procédait d'une intuition remarquable.

$$\langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(\Delta t, 0) | \psi_{\text{in}} \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \int_0^{\Delta t} dt' \langle b | \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{in}} \cdot \bar{\mathbf{D}}(t') | a \rangle \langle \phi_{\text{fin}}^R | \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{in}} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \quad (\text{D-2})$$

La probabilité $P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t)$ du processus d'absorption s'écrit :

$$P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \langle a | \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{in}}^* \cdot \bar{\mathbf{D}}(t') | b \rangle \langle \phi_{\text{fin}}^R | \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{in}}^* \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{fin}}^R \rangle \\ \times \int_0^{\Delta t} dt'' \langle b | \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{in}} \cdot \bar{\mathbf{D}}(t'') | a \rangle \langle \phi_{\text{fin}}^R | \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{in}} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t'') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \quad (\text{D-3})$$

La probabilité de trouver l'atome dans n'importe quel état final b autre que a , et quel que soit l'état final $|\phi_{\text{fin}}^R\rangle$ du rayonnement, est obtenue en sommant ce résultat sur tous les états $|b\rangle$ et $|\phi_{\text{fin}}^R\rangle$ possibles. Il apparaît alors deux relations de fermeture, l'une dans l'espace des états de l'atome⁸, l'autre dans celui du rayonnement, de sorte que l'expression précédente se simplifie en :

$$\sum_{b, \phi_{\text{fin}}^R} P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{\Delta t} dt'' G_a(t', t'') G_R^N(t', t'') \quad (\text{D-4})$$

avec les définitions :

$$G_a(t', t'') = \langle a | [\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{in}}^* \cdot \bar{\mathbf{D}}(t')] [\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{in}} \cdot \bar{\mathbf{D}}(t'')] | a \rangle \quad (\text{D-5})$$

et :

$$G_R^N(t', t'') = \langle \phi_{\text{in}}^R | [\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{in}}^* \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t')] [\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{in}} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t'')] | \phi_{\text{in}}^R \rangle \quad (\text{D-6})$$

Les deux opérateurs ainsi définis correspondent respectivement à la fonction de corrélation du dipôle atomique, et à celle du champ électrique rangé dans l'ordre normal.

Dans le cas général, où l'état initial du champ comprend plusieurs polarisations, interviennent dans (D-1) les éléments de matrice :

$$\sum_{j=x,y,z} \langle b | \bar{D}_j(t') | a \rangle \langle \phi_{\text{fin}}^R | \bar{E}_j(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \quad (\text{D-7})$$

avec :

$$\bar{D}_j(t) = \mathbf{e}_j \cdot \bar{\mathbf{D}}(t) \quad \text{et} \quad \bar{E}_j(\mathbf{R}, t) = \mathbf{e}_j \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{R}, t) \quad (\text{D-8})$$

où \mathbf{e}_j désigne le vecteur unitaire porté par chacun des trois axes $j = x, y, z$. La probabilité (D-4) devient alors :

$$\sum_{b, \phi_{\text{fin}}^R} P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t) = \sum_{j, j'=x,y,z} \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{\Delta t} dt'' G_a^{jj'}(t', t'') G_R^{jj'}(t', t'') \quad (\text{D-9})$$

8. Dans la sommation sur b , on peut inclure l'état atomique de départ a en notant que l'élément de matrice du dipôle atomique dans cet état est nul (ce qui découle d'un argument de parité).

avec les définitions suivantes de 9 fonctions de corrélation du dipôle, et 9 autres du champ électrique :

$$\begin{aligned} G_a^{jj'}(t', t'') &= \langle a | [\mathbf{e}_j^* \cdot \bar{\mathbf{D}}(t')] [\mathbf{e}_{j'} \cdot \bar{\mathbf{D}}(t'')] | a \rangle \\ G_R^{jj'}(t', t'') &= \langle \phi_{\text{in}}^R | [\mathbf{e}_j^* \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t')] [\mathbf{e}_{j'} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t'')] | \phi_{\text{in}}^R \rangle \end{aligned} \quad (\text{D-10})$$

C'est un tenseur des corrélations qui apparaît ainsi, ce qui alourdit un peu les équations, mais ne change pas l'essentiel des résultats.

D-2. Processus d'émission

Pour les processus d'émission de photons, spontanée ou stimulée, les calculs sont semblables. La différence principale est qu'il faut intervertir les opérateurs $\bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}$ et $\bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(-)}$, de sorte que les fonctions de corrélation du champ qui interviennent sont anti-normales au lieu de normales; de plus, il faut utiliser la formule plus générale (D-9) à la place de (D-4) car, dans un processus d'émission spontanée, aucune polarisation n'est privilégiée a priori.

E. Diffusion de photons par un atome

Nous considérons maintenant un processus de diffusion de photons où l'état initial comprend un atome dans l'état a et un photon incident, alors que dans l'état final l'atome est toujours dans l'état a , mais le photon incident est remplacé par un autre photon. Ce processus fait intervenir deux photons, puisqu'un photon disparaît et un autre apparaît.

E-1. Diffusion élastique

Comme au § B, nous traitons classiquement la position du centre de masse de l'atome, que nous supposons fixé à l'origine des axes (voir cependant la remarque de la page 525). L'état initial $|\psi_{\text{in}}\rangle$ du système atome + rayonnement à l'instant t_i correspond à un atome dans l'état a en présence d'un photon du mode i , de vecteur d'onde \mathbf{k}_i , polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ et fréquence ω_i (le rayonnement est supposé monochromatique) :

$$|\psi_{\text{in}}\rangle = |a; \mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i\rangle \quad \text{d'énergie} \quad E_{\text{in}} = E_a + \hbar\omega_i \quad (\text{E-1})$$

À l'instant final t_f , le processus de diffusion a fait disparaître le photon $\mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i$ pour le remplacer par un photon $\mathbf{k}_f, \boldsymbol{\varepsilon}_f$ de vecteur d'onde \mathbf{k}_f et de polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}_f$. L'état final du système est donc :

$$|\psi_{\text{fin}}\rangle = |a; \mathbf{k}_f, \boldsymbol{\varepsilon}_f\rangle \quad \text{d'énergie} \quad E_{\text{fin}} = E_a + \hbar\omega_f \quad (\text{E-2})$$

La conservation de l'énergie totale implique que $\omega_i = \omega_f$. La diffusion se fait donc sans changement de fréquence et est appelée pour cette raison "*diffusion élastique*". Nous étudierons au § E-3 le cas où l'état atomique final diffère de l'état atomique initial. Il s'agit alors d'un processus appelé "*diffusion Raman*".

Comme l'hamiltonien d'interaction dipolaire électrique (A-24) ne peut faire varier le nombre de photons que d'une unité, le système doit passer par un état

intermédiaire, dit “état relais” où l’atome se trouve dans un état c et le rayonnement dans un état différent de son état initial. Le terme d’ordre le plus bas du développement (A-12) pouvant contribuer à l’amplitude de diffusion est alors celui d’ordre deux.

E-1-a. Existence de deux types d’états relais

Deux types d’états relais sont possibles : ceux correspondant à des processus, que nous noterons (α), où le photon $\mathbf{k}_i, \varepsilon_i$ est d’abord absorbé, avant que le photon $\mathbf{k}_f, \varepsilon_f$ ne soit émis ; ceux correspondant à des processus, que nous noterons (β), où c’est d’abord le photon $\mathbf{k}_f, \varepsilon_f$ qui est émis, puis le photon $\mathbf{k}_i, \varepsilon_i$ absorbé. Dans le premier cas, l’état relais est l’état $|\psi_{\text{rel}}^\alpha\rangle = |c; 0\rangle$, où c est un état atomique relais et 0 le vide de rayonnement, puisque le photon $\mathbf{k}_i, \varepsilon_i$ présent dans l’état initial a été absorbé ; l’énergie de cet état relais est $E_{\text{rel}}^\alpha = E_c$. Dans le second cas, l’état relais est $|\psi_{\text{rel}}^\beta\rangle = |c; \mathbf{k}_i, \varepsilon_i; \mathbf{k}_f, \varepsilon_f\rangle$, puisque le photon $\mathbf{k}_f, \varepsilon_f$ a été émis avant que le photon $\mathbf{k}_i, \varepsilon_i$ n’ait encore été absorbé ; l’énergie de cet état relais est $E_{\text{rel}}^\beta = E_c + \hbar\omega_i + \hbar\omega_f$. Les figures 2 et 3 donnent deux représentations diagrammatiques différentes de ces deux mêmes processus.

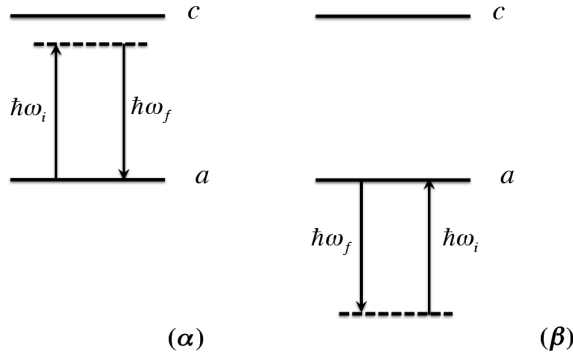


FIGURE 2 – Première représentation diagrammatique des processus de diffusion notés (α) et (β) dans le texte ; ces processus diffèrent par l’ordre temporel de l’absorption du photon incident et de l’émission du photon diffusé. Les flèches montantes représentent les processus d’absorption, les flèches descendantes les processus d’émission ; les lignes tiretées horizontales, qui visualisent le fait que les deux flèches ont même longueur, permettent de bien voir les différences d’énergie qui interviennent au dénominateur dans le calcul de l’amplitude de transition.

Dans la représentation de la Figure 2, une flèche montante représente une absorption, alors qu’une flèche descendante représente une émission. L’avantage de cette représentation est de faire apparaître directement la différence entre les énergies de l’état initial et de l’état relais, égale à $E_{\text{in}} - E_{\text{rel}}^\alpha = E_a + \hbar\omega_i - E_c$ pour les processus (α), et à $E_{\text{in}} - E_{\text{rel}}^\beta = E_a - \hbar\omega_f - E_c$ pour les processus (β) : cette différence n’est autre que la distance entre l’ordonnée de la ligne tiretée et celle de la ligne représentant l’état atomique relais c . En particulier, on voit que ces deux lignes coïncident pour les processus (α) quand $E_a + \hbar\omega_i = E_c$, c’est-à-dire quand l’absorption du photon

incident est résonnante sur la transition $a \leftrightarrow c$ (cas de la diffusion résonnante étudié plus loin).

Dans la représentation de la Figure 3, une flèche entrante représente une absorption alors qu'une flèche sortante représente une émission. En lisant le diagramme de bas en haut, on peut voir quels sont les états atomiques et les photons présents dans l'état initial, dans l'état relais, et dans l'état final. Pour les processus (α), aucun photon n'est présent dans l'état relais, alors que les photons incident et diffusé y sont tous deux présents pour les processus (β).

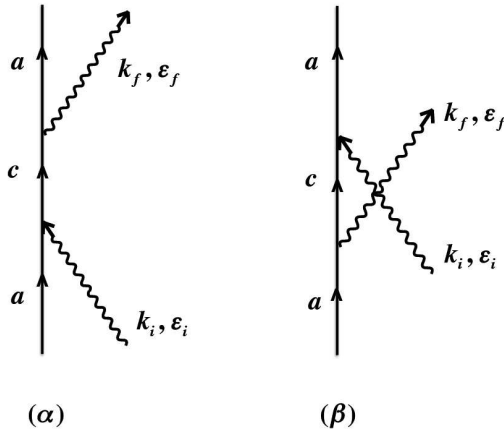


FIGURE 3 – Autre représentation diagrammatique possible des processus de diffusion (α) et (β). Les flèches entrantes représentent des absorptions alors que les flèches sortantes représentent des émissions. La lecture de chaque diagramme de bas en haut donne la succession temporelle des états du système atome + photons.

E-1-b. Calcul de l'amplitude de diffusion

Le calcul de l'amplitude de diffusion est du même type que ceux que nous avons déjà effectués plus haut. De plus, il est presque identique à celui de l'amplitude d'absorption à deux photons qui est présenté en détail dans le § 1 du Complément A_{XX}. Nous ne l'explicitons donc pas ici, nous contentant de souligner les différences avec les calculs de ce complément ; le lecteur intéressé par plus de détails est invité à le lire auparavant. Les relations (13) et (14) de ce complément deviennent ici :

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(\Delta t, 0) | \psi_{\text{in}} \rangle &= -2i\pi \left[A_{fi}^\alpha(E_{\text{in}}) + A_{fi}^\beta(E_{\text{in}}) \right] \delta^{(\Delta t)}(E_{\text{fin}} - E_{\text{in}}) \\
 &= -2i\pi \left[A_{fi}^\alpha(E_{\text{in}}) + A_{fi}^\beta(E_{\text{in}}) \right] \delta^{(\Delta t)}(\hbar\omega_f - \hbar\omega_i)
 \end{aligned}
 \tag{E-3}$$

où nous avons introduit les amplitudes de probabilité :

$$\begin{aligned}
 A_{fi}^\alpha(E_{\text{in}}) &= \sum_{|\psi_{\text{rel}}^\alpha\rangle} \frac{\langle \psi_{\text{fin}} | \mathbf{D} \cdot \mathbf{E}^{(-)} | \psi_{\text{rel}}^\alpha \rangle \langle \psi_{\text{rel}}^\alpha | \mathbf{D} \cdot \mathbf{E}^{(+)} | \psi_{\text{in}} \rangle}{E_{\text{in}} - E_{\text{rel}}^\alpha} \\
 &= -\frac{\hbar\sqrt{\omega_i\omega_f}}{2\epsilon_0 L^3} \sum_c \frac{\langle a | \boldsymbol{\varepsilon}_f^* \cdot \mathbf{D} | c \rangle \langle c | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{D} | a \rangle}{E_a + \hbar\omega_i - E_c}
 \end{aligned} \tag{E-4}$$

$$\begin{aligned}
 A_{fi}^\beta(E_{\text{in}}) &= \sum_{|\psi_{\text{rel}}^\beta\rangle} \frac{\langle \psi_{\text{fin}} | \mathbf{D} \cdot \mathbf{E}^{(+)} | \psi_{\text{rel}}^\beta \rangle \langle \psi_{\text{rel}}^\beta | \mathbf{D} \cdot \mathbf{E}^{(-)} | \psi_{\text{in}} \rangle}{E_{\text{in}} - E_{\text{rel}}^\beta} \\
 &= -\frac{\hbar\sqrt{\omega_i\omega_f}}{2\epsilon_0 L^3} \sum_a \frac{\langle a | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{D} | c \rangle \langle c | \boldsymbol{\varepsilon}_f^* \cdot \mathbf{D} | a \rangle}{E_a - \hbar\omega_f - E_c}
 \end{aligned} \tag{E-5}$$

Les deux amplitudes $A_{fi}^\alpha(E_{\text{in}})$ et $A_{fi}^\beta(E_{\text{in}})$ correspondent aux deux types d'états relais considérés plus haut. Dans (E-3), la fonction delta exprimant la conservation de l'énergie est proportionnelle à $\delta^{(\Delta t)}(\omega_f - \omega_i)$ puisque $E_{\text{fin}} - E_{\text{in}} = \hbar(\omega_f - \omega_i)$. Pour écrire (E-4) et (E-5), nous avons remplacé dans la relation (13) du Complément A_{XX} l'hamiltonien d'interaction H_I par $-\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}^{(+)}$ ou $-\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}^{(-)}$, suivant qu'il s'agit d'un processus d'absorption ou d'émission. Dans le numérateur des fractions figurant au second membre de (E-4), l'opérateur $\mathbf{E}^{(+)}$ (qui absorbe le photon incident) apparaît avant l'opérateur $\mathbf{E}^{(-)}$ (qui crée le photon diffusé); c'est bien ce que l'on attend pour un processus de type (α). L'ordre des deux opérateurs $\mathbf{E}^{(+)}$ et $\mathbf{E}^{(-)}$ est inversé dans (E-5), comme attendu pour un processus de type (β). Les coefficients en $\sqrt{\omega_i\omega_f}$ dans les deuxièmes lignes de ces égalités proviennent du développement (A-27) du champ électrique en ondes planes; L est la longueur du côté de la cavité cubique dans laquelle est quantifié le champ. Nous pourrions leur ajouter un facteur $\sqrt{n_i n_f}$, où n_i et n_f sont les nombres de photons dans l'état initial et l'état final; mais, pour simplifier, nous avons supposé que $n_i = n_f = 1$.

E-1-c. Interprétation semi-classique

La diffusion élastique peut également être expliquée par un traitement semi-classique, où seul l'atome est traité quantiquement; l'onde incidente est décrite comme un champ classique de fréquence ω_i . Cette onde induit dans l'atome un dipôle oscillant à la même fréquence, qui rayonne dans tout l'espace un champ oscillant à la même fréquence.

L'approche semi-classique permet aussi d'interpréter simplement l'absorption du faisceau incident comme résultant d'une interférence destructive, dans la direction du champ incident, entre ce champ et celui diffusé par le dipôle induit. On peut également utiliser une telle description pour rendre compte de l'amplification d'un faisceau incident par un milieu atomique dont les populations sont "inversées", c'est-à-dire un milieu où la population d'un niveau excité est supérieure à la population d'un niveau d'énergie inférieure.

E-1-d. Diffusion Rayleigh

Supposons que la fréquence ω_i du rayonnement incident soit très petite devant toutes les fréquences atomiques $|E_c - E_a|/\hbar$. On peut alors négliger ω_i et ω_f dans

les dénominateurs des deuxièmes lignes de (E-4) et (E-5). La seule dépendance en ω_i des amplitudes de diffusion provient alors du préfacteur $\sqrt{\omega_i \omega_f}$, qui est égal à ω_i puisque $\omega_f = \omega_i$. La section efficace de diffusion fait intervenir le produit du module carré de l'amplitude, variant en ω_i^2 , par la densité d'états finals du rayonnement à la fréquence $\omega_f = \omega_i$, variant elle aussi en ω_i^2 . La section efficace de diffusion varie donc en ω_i^4 ; elle est par suite beaucoup plus importante pour la lumière bleue que pour la lumière rouge.

On appelle "diffusion Rayleigh" la diffusion élastique lorsque $\omega_i \ll |E_c - E_a|/\hbar$. Elle intervient pour rendre compte de la diffusion du spectre visible de la lumière solaire par les molécules d'oxygène et d'azote de l'atmosphère, qui ont des fréquences de résonance beaucoup plus élevées, situées dans l'ultraviolet. Cette variation rapide de la section efficace de diffusion Rayleigh avec la fréquence est une raison qui explique le bleu du ciel.

E-2. Diffusion résonnante

Supposons que la fréquence ω_i du photon incident soit très voisine de la fréquence :

$$\omega_{ca} = (E_c - E_a)/\hbar \tag{E-6}$$

d'une transition reliant l'état a à un état c d'énergie plus élevée. L'absorption du photon incident est alors résonnante sur la transition $a \leftrightarrow c$ et l'amplitude (E-4) devient très grande lorsque l'état c est pris pour état atomique relais – elle diverge même si la condition de résonance est exactement satisfaite. On peut dans ce cas négliger tous les processus de type (β) ; de plus, s'il existe d'autres états atomiques relais possibles d, e, \dots , on peut se limiter au seul terme faisant intervenir c .

Pour résoudre les difficultés liées à la divergence de (E-4) quand $\omega_i = \omega_a - \omega_c$, il est commode d'utiliser l'expression exacte (A-14) qui ne comporte que trois termes, au lieu d'une infinité dans le développement (A-12) de l'opérateur d'évolution. Seul le dernier de ces trois termes peut jouer un rôle, puisqu'il peut détruire un photon et en créer un autre. On obtient alors :

$$\begin{aligned} &\langle \psi_{\text{fin}} | U(t_f, t_i) | \psi_{\text{in}} \rangle \\ &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^t dt' \langle \psi_{\text{fin}} | U_0(t_f, t) H_I U(t, t') H_I U_0(t', t_i) | \psi_{\text{in}} \rangle \end{aligned} \tag{E-7}$$

C'est ici $U(t, t')$ qui apparaît au centre de l'élément de matrice de (E-7), et non $U_0(t, t')$. Si l'on part de $|\psi_{\text{in}}\rangle = |a; \mathbf{k}_i, \varepsilon_i\rangle$, le premier hamiltonien d'interaction H_I de (E-7) fait passer à l'état $|c; 0\rangle$. De même, si l'on part de $\langle \psi_{\text{fin}} |$, le second hamiltonien d'interaction H_I de (E-7) fait passer à l'état $\langle c; 0 |$. L'expression (E-7) peut donc s'écrire également :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\text{fin}} | U(t_f, t_i) | \psi_{\text{in}} \rangle &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{t_i}^t dt' \langle a; \mathbf{k}_f, \varepsilon_f | U_0(t_f, t) H_I | c; 0 \rangle \\ &\quad \times \langle c; 0 | U(t, t') | c; 0 \rangle \langle c; 0 | H_I U_0(t', t_i) | a; \mathbf{k}_i, \varepsilon_i \rangle \end{aligned} \tag{E-8}$$

Si l'on était parti de (A-12) au lieu de (A-14), l'élément de matrice central de (E-8) serait $\langle c; 0 | U_0(t, t') | c; 0 \rangle = \exp(-iE_c(t - t'))$. Mais l'utilisation de (A-14)

conduit à $\langle c; 0|U(t, t')|c; 0\rangle$ qui représente l'amplitude de probabilité pour que le système, partant de l'état $|c; 0\rangle$ à l'instant t' , soit encore dans ce même état à l'instant t . Le calcul de cette amplitude apparaît dans l'étude de la désintégration radiative de l'état excité par émission spontanée d'un photon, donc la désintégration d'un état discret $|c; 0\rangle$ couplé à un continuum d'états finals $|a; \mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}\rangle$; ces derniers représentent l'atome dans l'état a en présence d'un photon de vecteur d'onde \mathbf{k} et de polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}$ quelconques. Or nous avons montré dans le Complément D_{XIII} (§ 4) qu'il était possible d'obtenir une solution de l'équation de Schrödinger fournissant l'amplitude $\langle c; 0|U(t, t')|c; 0\rangle$ pour les temps longs (et non pas seulement pour les temps courts comme avec la solution perturbative). Cette solution s'écrit :

$$\langle c; 0|U(t, t')|c; 0\rangle = \exp[-i(E_c + \delta E_c)(t - t')/\hbar] \exp[-\Gamma_c(t - t')/2] \quad (\text{E-9})$$

où δE_c est le déplacement de l'état $|c; 0\rangle$ dû à son couplage avec le continuum d'états finals⁹, et Γ_c la largeur naturelle de l'état excité c (inverse de la durée de vie radiative de cet état). Nous supposons désormais que le déplacement δE_c est inclus dans la définition de l'énergie E_c de l'état c . Le traitement plus précis consistant à partir de (A-14) au lieu de (A-12) conduit donc à un résultat très simple : il suffit de remplacer, dans tous les calculs de l'amplitude de diffusion, E_c par $E_c - i\hbar\Gamma_c/2$.

$$E_c \rightarrow E_c - i\hbar\Gamma_c/2 \quad (\text{E-10})$$

Cette substitution faite on obtient, en ne gardant que l'amplitude (E-4) et le seul état atomique relais c , l'amplitude de diffusion suivante :

$$\bar{A}_{fi}(E_{\text{in}}) = -\frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3} \frac{\langle a|\boldsymbol{\varepsilon}_f^* \cdot \mathbf{D}|c\rangle \langle c|\boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{D}|a\rangle}{\hbar(\omega_i - \omega_{ca} + i\Gamma_c/2)} \quad (\text{E-11})$$

qui ne diverge donc plus quand $\omega_i = \omega_{ca}$; lorsqu'on balaie ω_i autour de ω_{ca} , cette amplitude de diffusion varie de manière résonnante sur un intervalle de largeur Γ_c .

E-3. Diffusion inélastique. Diffusion Raman

Nous considérons toujours un processus de diffusion au cours duquel un photon incident est absorbé et un autre photon émis, mais l'état atomique final a' est maintenant supposé différent de l'état atomique initial a .

E-3-a. Différences avec la diffusion élastique

La figure 4 montre un exemple d'un processus, appelé "*diffusion Raman*", où l'énergie du photon émis diffère de celle du photon incident¹⁰. L'état initial du processus de diffusion est donc, comme plus haut, l'état $|\psi_{\text{in}}\rangle = |a; \mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i\rangle$, d'énergie $E_{\text{in}} = E_a + \hbar\omega_i$; en revanche, l'état final est maintenant $|\psi_{\text{fin}}\rangle = |a'; \mathbf{k}_f, \boldsymbol{\varepsilon}_f\rangle$ avec $a' \neq a$, d'énergie $E_{\text{fin}} = E_{a'} + \hbar\omega_f$.

La conservation de l'énergie totale implique que :

$$E_a + \hbar\omega_i = E_{a'} + \hbar\omega_f \quad (\text{E-12})$$

9. Ce déplacement est relié au "déplacement de Lamb" des états atomiques excités.

10. Cette figure ne représente que le processus de type (α) , celui au cours duquel le photon incident est absorbé en premier.

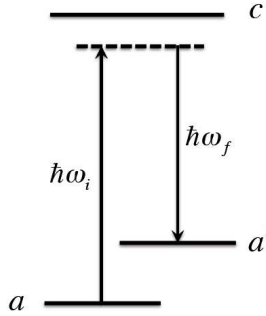


FIGURE 4 – Diffusion Raman : un photon incident d'énergie $\hbar\omega_i$ est absorbé par un atome dans l'état a , puis un photon $\hbar\omega_f$ est émis par l'atome ; ce dernier aboutit dans l'état final a' différent de l'état initial a .

Si $E_{a'} > E_a$, la diffusion Raman est dite “diffusion Raman Stokes” ; l'énergie du photon diffusé est inférieure à celle du photon incident. Si $E_{a'} < E_a$, la diffusion Raman est dite “diffusion Raman anti-Stokes” ; l'énergie du photon diffusé est supérieure à celle du photon incident. Comme nous supposons ici le mode $\mathbf{k}_f, \varepsilon_f$ initialement vide, le photon qui apparaît au cours du processus de diffusion est émis de manière spontanée. La diffusion Raman est alors dite “diffusion Raman spontanée”. Nous étudierons plus loin le cas où des photons $\mathbf{k}_f, \varepsilon_f$ sont initialement présents, situation qui donne naissance à une “diffusion Raman stimulée”.

L'équation (E-12) montre que la fréquence angulaire de la lumière diffusée diffère de celle de la lumière incidente par une quantité $\omega_{aa'} = (E_a - E_{a'})/\hbar$, égale à la fréquence de la transition atomique $a \leftrightarrow a'$. La mesure du spectre de la lumière Raman renseigne donc sur les fréquences propres du système diffuseur ; c'est le principe de la *spectroscopie Raman*. Souvent, les systèmes étudiés sont des molécules et les états a, a' sont des états de vibration ou de rotation du niveau électronique fondamental, de sorte que les fréquences $\omega_{aa'}$ tombent dans le domaine microonde ou infrarouge. Au lieu de mesurer directement ces fréquences par spectroscopie dans un domaine où la détection peut présenter des difficultés, il s'avère parfois plus commode d'éclairer le milieu avec un faisceau de fréquence optique ou ultraviolette et de mesurer indirectement les fréquences $\omega_{aa'}$ par l'intermédiaire des décalages de fréquence de la lumière Raman diffusée. La possibilité d'utiliser des sources laser a permis de développer considérablement la spectroscopie Raman grâce aux gains d'intensité obtenus. Il est également possible d'améliorer les conditions de détection en utilisant un faisceau laser incident, qui peut être focalisé sur un petit volume. L'analyse du spectre de la lumière diffusée devient alors un puissant outil d'analyse locale de la composition chimique de tout milieu diffuseur, puisque chaque molécule peut être détectée par ses fréquences propres de vibration-rotation spécifiques.

Nous nous sommes limités, pour simplifier, à la discussion de la diffusion Raman par des atomes ou des molécules en milieu dilué, où chaque diffuseur agit individuellement. Cependant la diffusion Raman permet aussi d'étudier des milieux condensés comme des liquides, des cristaux, des surfaces, etc. et de fournir de riches informations sur la dynamique de ces milieux.

E-3-b. Amplitude de diffusion

Le calcul de l'amplitude de diffusion Raman est très proche de celui conduisant à (E-3), (E-4) et (E-5), et conduit à :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(\Delta t, 0) | \psi_{\text{in}} \rangle &= -2\pi i \left[A_{fi}^\alpha(E_{\text{in}}) + A_{fi}^\beta(E_{\text{in}}) \right] \delta^{(\Delta t)}(E_{\text{fin}} - E_{\text{in}}) \\ &= -2\pi i \left[A_{fi}^\alpha(E_{\text{in}}) + A_{fi}^\beta(E_{\text{in}}) \right] \delta^{(\Delta t)}(E_{a'} + \hbar\omega_f - E_a - \hbar\omega_i) \end{aligned} \quad (\text{E-13})$$

où :

$$\begin{aligned} A_{fi}^\alpha(E_{\text{in}}) &= \sum_{|\psi_{\text{rel}}^\alpha\rangle} \frac{\langle \psi_{\text{fin}} | \mathbf{D} \cdot \mathbf{E}^{(-)} | \psi_{\text{rel}}^\alpha \rangle \langle \psi_{\text{rel}}^\alpha | \mathbf{D} \cdot \mathbf{E}^{(+)} | \psi_{\text{in}} \rangle}{E_{\text{in}} - E_{\text{rel}}^\alpha} \\ &= -\frac{\hbar\sqrt{\omega_i\omega_f}}{2\epsilon_0 L^3} \sum_c \frac{\langle a' | \boldsymbol{\varepsilon}_f^* \cdot \mathbf{D} | c \rangle \langle c | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{D} | a \rangle}{E_a + \hbar\omega_i - E_c} \end{aligned} \quad (\text{E-14})$$

$$\begin{aligned} A_{fi}^\beta(E_{\text{in}}) &= \sum_{|\psi_{\text{rel}}^\beta\rangle} \frac{\langle \psi_{\text{fin}} | \mathbf{D} \cdot \mathbf{E}^{(+)} | \psi_{\text{rel}}^\beta \rangle \langle \psi_{\text{rel}}^\beta | \mathbf{D} \cdot \mathbf{E}^{(-)} | \psi_{\text{in}} \rangle}{E_{\text{in}} - E_{\text{rel}}^\beta} \\ &= -\frac{\hbar\sqrt{\omega_i\omega_f}}{2\epsilon_0 L^3} \sum_a \frac{\langle a' | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{D} | c \rangle \langle c | \boldsymbol{\varepsilon}_f^* \cdot \mathbf{D} | a \rangle}{E_a - \hbar\omega_f - E_c} \end{aligned} \quad (\text{E-15})$$

Si la fréquence ω_i du photon incident est voisine de la fréquence de la transition $a \rightarrow c$, l'amplitude (E-14) peut devenir très grande; la diffusion Raman est alors résonnante. Pour éviter la divergence de (E-14) il suffit, comme pour la diffusion élastique résonnante, de remplacer E_c par $E_c - i\Gamma_c/2$, où Γ_c est la largeur naturelle de l'état c .

E-3-c. Interprétation semi-classique

Comme dans le § E-1-c, considérons le dipôle induit par le champ incident sur le système diffuseur. Si ce système diffuseur est une molécule qui vibre et qui tourne, sa polarisabilité varie au cours du temps, de sorte qu'elle est modulée à ses fréquences de rotation et de vibration. L'oscillation du dipôle qu'induit le champ incident voit donc son amplitude modulée aux fréquences de rotation et de vibration de la molécule. L'analyse de Fourier du mouvement du dipôle fait alors apparaître des bandes latérales; les fréquences de ces dernières diffèrent de celle du champ incident par les fréquences de rotation et de vibration de la molécule. L'interprétation semi-classique redonne ainsi les propriétés essentielles du spectre de diffusion Raman.

E-3-d. Diffusion Raman stimulée. Laser Raman

Nous supposons maintenant que le photon Raman apparaît dans un mode qui n'est pas initialement vide, car $n_f \neq 0$ photons se trouvent déjà initialement dans le mode $\mathbf{k}_f, \boldsymbol{\varepsilon}_f$. De même, plusieurs photons, en nombre n_i , se trouvent initialement dans le mode $\mathbf{k}_i, \boldsymbol{\varepsilon}_i$. Dans l'amplitude du processus de diffusion Raman $|a; n_i, n_f\rangle \rightarrow |a'; n_i - 1, n_f + 1\rangle$, il faut introduire le facteur $\sqrt{n_i(n_f + 1)}$ dans les expressions (E-14) et (E-15). On constate alors les effets de l'émission stimulée : le facteur $n_f + 1$

dans la probabilité traduit le fait que la présence initiale de n_f photons dans le mode $\mathbf{k}_f, \varepsilon_f$ stimule la probabilité d'émission d'un photon Raman dans ce même mode; elle est donc multipliée par le facteur $n_f + 1$ par rapport au cas où il était initialement vide.

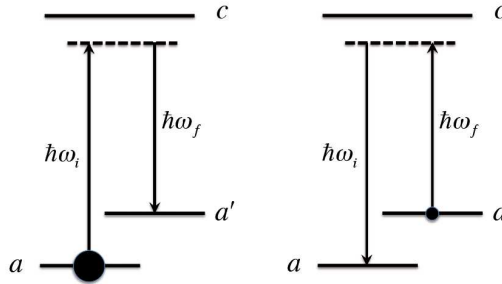


FIGURE 5 – La partie gauche de la figure représente un processus Raman stimulé au cours duquel un atome dans le niveau a absorbe un photon ω_i pour aboutir dans l'état a' en émettant de manière stimulée un photon ω_f . La partie droite de la figure montre le processus inverse, au cours duquel l'atome partant de a' absorbe un photon ω_f puis émet de manière stimulée un photon ω_i . Les deux processus ont a priori la même probabilité. Cependant, si la population de l'état a (représentée par le gros cercle de la partie gauche de la figure) est supérieure à celle de l'état a' (représentée par le petit cercle de la partie droite de la figure), le nombre de processus au cours desquels le photon ω_f est émis de manière stimulée est supérieur au nombre de processus au cours desquels il est absorbé. Le rayonnement à la fréquence ω_f est alors amplifié par émission stimulée, ce qui permet de réaliser un "laser Raman" à cette fréquence.

Considérons alors (Fig. 5) le processus de diffusion inverse $|a'; n_i - 1, n_f + 1\rangle \rightarrow |a; n_i, n_f\rangle$. L'amplitude de diffusion est simplement la complexe conjuguée de la précédente; les probabilités des deux processus sont donc égales. Si l'on part d'un nombre d'atomes égal dans l'état a et dans l'état a' , le nombre de photons qui apparaissent au cours d'un processus est égal au nombre de photons qui disparaissent dans le processus inverse. Que se passe-t-il si l'on part d'un ensemble quelconque d'atomes, où les populations des états a et a' ne sont pas égales? Les mécanismes de relaxation conduisant à l'équilibre thermodynamique tendent à faire que la population du niveau d'énergie la plus basse, par exemple a , soit plus grande que celle du niveau a' d'énergie plus élevée. Le nombre de processus de diffusion $|a; n_i, n_f\rangle \rightarrow |a'; n_i - 1, n_f + 1\rangle$ est alors plus élevé que celui des processus $|a'; n_i - 1, n_f + 1\rangle \rightarrow |a; n_i, n_f\rangle$, entraînant une amplification du nombre de photons ω_f . C'est ce mécanisme d'amplification qui est à la base du fonctionnement des lasers Raman. Ces lasers diffèrent sur deux points importants de ceux qui mettent en jeu une transition directe entre un niveau supérieur, alimenté par un processus de pompage, et un niveau inférieur (sans niveau relais). Tout d'abord, ils ne nécessitent pas une inversion de populations; le milieu atomique peut donc être à l'équilibre thermodynamique, la diffusion Raman stimulée à partir de l'état atomique le plus peuplé étant à l'origine de l'amplification. Ils nécessitent cependant la présence d'un rayonnement intense à la fréquence ω_i , fourni par un autre laser appelé "laser de

pompe”. D’autre part, la fréquence ω_f de l’oscillation laser peut être balayée en changeant la “fréquence de pompe” ω_i , alors que les lasers utilisant un système à deux niveaux oscillent nécessairement à une fréquence très proche de celle de la transition atomique, de sorte qu’ils sont très peu accordables.

Conservation de l’impulsion totale

Si la position \mathbf{R} du centre de masse de l’atome n’est plus traitée classiquement et placée à l’origine des coordonnées comme nous l’avons fait jusqu’ici, il faut garder les exponentielles $\exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R})$ et $\exp(-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{R})$ dans les hamiltoniens d’interaction décrivant l’absorption d’un photon ω_i et l’émission d’un photon ω_f . L’élément de matrice du produit de ces deux opérateurs doit être pris entre un état initial du centre de masse d’impulsion $\hbar\mathbf{K}_{\text{in}}$ et un état final d’impulsion $\hbar\mathbf{K}_{\text{fin}}$. Il apparaît donc une fonction $\delta(\mathbf{K}_{\text{fin}} - \mathbf{K}_{\text{in}} - \mathbf{k}_i + \mathbf{k}_f)$ exprimant la conservation de l’impulsion globale au cours du processus Raman : l’impulsion de l’atome augmente d’une quantité égale à $\hbar(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f)$ au cours du processus. Souvent, les deux états atomiques a et a' sont deux sous-niveaux d’un même état électronique fondamental, de sorte que la fréquence $\omega_{a'a} = (E_{a'} - E_a)/\hbar$ tombe dans le domaine micro-onde ; elle est très petite devant les fréquences ω_i et ω_f , qui sont plutôt des fréquences optiques. L’équation de conservation de l’énergie (E-12) entraîne alors que les modules des deux vecteurs d’onde \mathbf{k}_i et \mathbf{k}_f sont pratiquement égaux. Si les deux vecteurs d’onde \mathbf{k}_i et \mathbf{k}_f ont des directions opposées, l’impulsion gagnée par l’atome au cours du processus Raman est égale à $\hbar(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \simeq 2\hbar\mathbf{k}_i$. L’intérêt d’un tel processus Raman est qu’il peut coupler deux états a et a' très proches l’un de l’autre en communiquant à l’atome dans l’un des deux états une grande impulsion $2\hbar\mathbf{k}_i$, égale à deux fois celle d’un photon optique. En revanche, si l’on couplait directement a et a' par absorption d’un seul photon dans le domaine micro-onde, le transfert d’impulsion serait beaucoup plus faible. Cette possibilité de coupler deux sous-niveaux fondamentaux, donc de longue durée de vie, en communiquant à l’atome dans l’un de ces deux états une grande impulsion, a des applications intéressantes, notamment en interférométrie atomique.

Dans le Complément A_{XX}, nous étudions des processus multiphotoniques impliquant l’absorption de plusieurs photons dans une transition entre deux états atomiques. Jusqu’ici, nous nous sommes limités à des processus d’absorption et d’émission entre deux états atomiques discrets ; le Complément B_{XX} étend l’étude de l’absorption de photons à des processus reliant un état atomique discret à un continuum. Il s’agit de processus de “*photo-ionisation*” au cours desquels un électron est arraché à l’atome. Dans le Complément C_{XX} nous introduisons, dans le cas de niveaux discrets couplés entre eux par des rayonnements monochromatiques, la méthode de l’“*atome habillé*” qui permet de traiter l’effet du couplage atome-rayonnement à tous les ordres. Cette méthode nous permettra aussi d’introduire des effets importants, en particulier les “*déplacements lumineux*”, qui se sont révélés comme des outils très utiles dans plusieurs domaines de recherche, comme nous le discutons au Complément D_{XX}. Finalement, dans le Complément E_{XX}, nous montrons comment l’utilisation de paquets d’ondes de photons permet d’ajouter une dépendance temporelle aux processus étudiés.

**A_{XX} : PROCESSUS MULTIPHOTONIQUE,
ABSORPTION À DEUX PHOTONS**

Dans un processus d'absorption multiphotonique, un atome absorbe simultanément plusieurs photons. Ce complément étudie le cas le plus simple, celui où deux photons sont absorbés, mais les idées générales s'appliquent également aux processus mettant en jeu un plus grand nombre de photons. Les excitations en raie monochromatique, puis en raie large, sont successivement considérées. Le temps très court pendant lequel le système passe par l'état relais violant la conservation de l'énergie est proportionnel à l'inverse du défaut d'énergie.

B_{XX} : PHOTO-IONISATION

Lors du processus de photo-ionisation, un photon peut arracher un électron à un atome, qui devient alors un ion (effet photo-électrique). Ce complément montre comment ce processus peut être étudié dans le cadre d'une théorie quantifiée du rayonnement lorsque ce dernier couple, non pas deux niveaux discrets de l'atome, mais un niveau discret (fondamental) à un continuum de niveaux (excités). Deux cas importants sont étudiés : celui où le rayonnement incident est quasi monochromatique, et celui où il est au contraire à bande large. Dans le second cas, cette étude permet de justifier l'équation d'Einstein de l'effet photo-électrique. On étudie enfin ce qui se produit lorsque le champ de rayonnement est très intense de sorte que l'ionisation de l'atome se fait, non pas par absorption d'un ou plusieurs photons, mais par effet tunnel.

**C_{XX} : ATOME À DEUX NIVEAUX DANS UN
CHAMP MONOCHROMATIQUE; MÉTHODE DE
L'ATOME HABILÉ**

La méthode de l'atome habillé est un outil puissant permettant de décrire et d'interpréter les effets d'ordre supérieur apparaissant lorsqu'un atome à deux niveaux interagit avec un rayonnement quasi résonnant. Elle est valable à la fois dans le domaine des couplages faibles (champ peu intense) et fort (champ très intense). Un paramètre essentiel est le rapport entre la fréquence d'oscillation de Rabi (qui caractérise le couplage avec le champ) et la largeur naturelle des niveaux atomiques. Cette approche générale permet en particulier de bien comprendre les diverses propriétés des déplacements lumineux.

D_{xx} : LES DÉPLACEMENTS LUMINEUX : UN OUTIL POUR MANIPULER LES ATOMES ET LE CHAMP

L'utilisation des déplacements lumineux est devenue un outil de base en physique atomique, car il permet la manipulation d'atomes et de photons. Nous décrivons brièvement dans ce complément un certain nombre d'applications de ces méthodes : pièges optiques à atomes par forces dipolaires, miroirs à atomes, réseaux optiques, refroidissement "Sisyphé", et détection un par un des photons dans une cavité.

E_{xx} : DÉTECTION DE PAQUETS D'ONDES À UN OU DEUX PHOTONS, INTERFÉRENCES

Pour un photon on peut, comme pour une particule massive, construire des paquets d'ondes par superposition cohérente d'états d'impulsions différentes; on obtient ainsi une propagation du rayonnement dans l'espace libre, et donc la possibilité de faire arriver un photon sur un atome. Ceci conduit à une description plus réaliste des processus d'absorption et de diffusion de photons que celle du Chapitre XX, où le rayonnement incident est décrit par un état de Fock à nombre bien défini de photons (donc sans aucune propagation spatiale). Nous introduisons pour le photon une fonction qui n'est pas sa fonction d'onde, mais fournit l'amplitude de probabilité qu'il soit détecté en un point donné. L'absorption et la diffusion de paquets d'ondes sont étudiées, ainsi que les signaux de détection à un ou plusieurs photons; le cas de deux photons intriqués (conversion paramétrique) est traité en fin de complément.

Complément A_{XX}

Exemple de processus multiphotonique : absorption à deux photons

1	Rayonnement monochromatique	529
2	Rayonnement non monochromatique	533
	2-a Amplitude de probabilité, probabilité	534
	2-b Probabilité par unité de temps pour un état de Fock du rayonnement	536
3	Discussion physique	537
	3-a Lois de conservation	538
	3-b Cas où l'état relais devient résonnant pour l'absorption à un photon	539

Nous étudions dans ce complément un processus au cours duquel l'atome absorbe, non pas un, mais deux photons d'énergie $\hbar\omega_i$ pour passer d'un niveau discret a vers un autre niveau discret b d'énergie plus élevée¹ ; ce processus est schématisé sur la Figure 1. Pour l'instant, nous ignorons les degrés de liberté externes en supposant l'atome infiniment lourd². La conservation de l'énergie globale implique alors que :

$$E_b - E_a = \hbar\omega_0 = 2\hbar\omega_i \tag{1}$$

Nous verrons au cours du calcul de l'amplitude de transition comment cette condition de conservation apparaît effectivement.

1. Rayonnement monochromatique

L'étude de ce processus demande le calcul de l'amplitude de transition :

$$\langle \psi_{\text{fin}} | U(t_f, t_i) | \psi_{\text{in}} \rangle \tag{2}$$

L'état initial à l'instant t_i du système atome + rayonnement est :

$$| \psi_{\text{in}} \rangle = | a; n_i \rangle \quad \text{d'énergie} \quad E_{\text{in}} = E_a + n_i \hbar\omega_i \tag{3}$$

Il représente un atome dans l'état a en présence de n_i photons du mode i , de vecteur d'onde \mathbf{k}_i , polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ et fréquence ω_i (le rayonnement est supposé monochromatique). A l'issue du processus d'absorption, à l'instant t_f , le nombre de photons a diminué de deux unités, passant de n_i à $n_i - 2$, et l'état du système global est noté :

$$| \psi_{\text{fin}} \rangle = | b; n_i - 2 \rangle \quad \text{d'énergie} \quad E_{\text{fin}} = E_b + (n_i - 2) \hbar\omega_i \tag{4}$$

1. Dans le Complément B_{XX}, nous verrons comment des processus multiphotoniques peuvent également faire passer un atome d'un état discret vers un état final appartenant à un continuum (photo-ionisation).

2. Lorsque sa masse est finie, il existe des effets physiques intéressants liés à la conservation de l'impulsion totale ; nous les étudierons plus loin (cf. § 3 ; voir aussi le § 2 du Complément A_{XIX}).

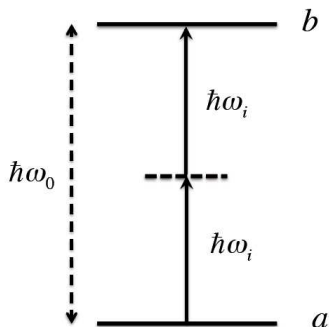


FIGURE 1 – Au cours d’une transition à deux photons, l’atome passe de l’état a à l’état b en absorbant deux photons d’énergie $\hbar\omega_i$. La ligne horizontale tiretée représente l’énergie médiane entre les niveaux a et b . La transition fait intervenir un troisième niveau, le niveau relais c , dont l’énergie n’est pas nécessairement comprise entre celles des niveaux a et b ; il n’est pas représenté sur la figure. On suppose cependant que l’énergie du niveau atomique relais c est suffisamment distante de la ligne médiane tiretée pour qu’aucune transition résonnante à un photon de a vers c ne se produise.

Pour décrire l’interaction atome-rayonnement, nous continuerons à utiliser l’hamiltonien dipolaire électrique (A-30) du Chapitre XX qui diminue d’une seule unité le nombre de photons. Dans le développement de $\bar{U}(t_f, t_i)$ écrit au Chapitre XX en (A-21), le premier terme qui peut donner une contribution non nulle à l’amplitude de transition (2) est donc le terme d’ordre deux, contenant deux opérateurs H_I : le premier fait passer le système atome + rayonnement de l’état initial $|\psi_{\text{in}}\rangle = |a, n_i\rangle$ à un “état relais” intermédiaire :

$$|\psi_{\text{rel}}\rangle = |c, n_i - 1\rangle \quad \text{d’énergie} \quad E_{\text{rel}} = E_c + (n_i - 1)\hbar\omega_i \quad (5)$$

où c est un état atomique quelconque ; le second opérateur H_I fait passer le système de cet état relais $|\psi_{\text{rel}}\rangle$ à l’état final $|\psi_{\text{fin}}\rangle = |b, n_i - 2\rangle$. Il faut bien sûr sommer sur tous les états intermédiaires accessibles c mais, pour simplifier le calcul, nous ne prendrons en compte qu’un seul état intermédiaire (la sommation sur ces états des amplitudes de probabilité ne pose aucun problème particulier). Si nous insérons la relation (A-21) du Chapitre XX entre le bra $\langle\psi_{\text{fin}}|$ et le ket $|\psi_{\text{in}}\rangle$, les deux premiers

termes du membre de droite s'annulent, et le troisième terme fournit³ :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(\Delta t, 0) | \psi_{\text{in}} \rangle &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \sum_{\psi_{\text{rel}}} \langle \psi_{\text{fin}} | H_I | \psi_{\text{rel}} \rangle \langle \psi_{\text{rel}} | H_I | \psi_{\text{in}} \rangle \times \\ &\times \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{t'} dt'' e^{iE_{\text{fin}}t'/\hbar} e^{-iE_{\text{rel}}(t'-t'')/\hbar} e^{-iE_{\text{in}}t''/\hbar} \end{aligned} \quad (6)$$

L'exposant dans l'intégrale de la seconde ligne contient :

$$i[E_b + (n_i - 2)\hbar\omega_i]t' - i[E_c + (n_i - 1)\hbar\omega_i](t' - t'') - i[E_a + n_i\hbar\omega_i]t'' \quad (7)$$

d'où les termes en n_it' et n_it'' disparaissent, laissant l'expression :

$$i[E_b - E_a - 2\hbar\omega_i]t' - i[E_a - E_c + \hbar\omega_i](t'' - t') \quad (8)$$

Prenant comme plus haut les variables d'intégration t' et $\tau = t'' - t'$, nous obtenons l'intégrale double :

$$\int_0^{\Delta t} dt' e^{i[E_b - E_a - 2\hbar\omega_i]t'/\hbar} \int_{-t'}^0 d\tau e^{i[E_c - E_a - \hbar\omega_i]\tau/\hbar} \quad (9)$$

soit :

$$\int_0^{\Delta t} dt' e^{i[E_b - E_a - 2\hbar\omega_i]t'/\hbar} \frac{i\hbar}{[E_a + \hbar\omega_i - E_c]} \left[1 - e^{i[E_a + \hbar\omega_i - E_c]t'/\hbar} \right] \quad (10)$$

Nous nous intéressons à des situations où la fréquence des photons $\omega_i/2\pi$ est proche de la fréquence de résonance à deux photons correspondant à la relation de conservation de l'énergie (1). De plus, nous supposons qu'il s'agit véritablement d'une transition directe à deux photons, et non pas d'une succession d'absorptions à un photon. Nous considérons donc que le niveau a n'est pas susceptible d'absorber de façon résonnante un photon pour effectuer une transition vers le niveau intermédiaire c ; il faut pour cela supposer que l'énergie E_c du niveau intermédiaire c est nettement différente de l'énergie médiane $(E_a + E_b)/2$ représentée par le trait horizontal tireté de la figure 1. On vérifie que le terme en 1 dans le crochet de (10) correspond bien à une résonance pour une absorption à deux photons, puisqu'il conduit à l'amplitude de probabilité :

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{[E_a + \hbar\omega_i - E_c]} \int_0^{\Delta t} dt' e^{i[E_b - 2\hbar\omega_i - E_a]t'/\hbar} \\ \sim \frac{2i\pi\hbar^2}{[E_a + \hbar\omega_i - E_c]} \delta^{(\Delta t)}(E_b - E_a - 2\hbar\omega_i) \end{aligned} \quad (11)$$

3. Nous avons supposé que les deux photons absorbés étaient identiques. Si les deux photons 1 et 2 absorbés différaient, soit par l'énergie, soit par la direction du vecteur d'onde, soit par la polarisation (tout en satisfaisant bien sûr à la condition de conservation de l'énergie $\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 = E_b - E_a = \hbar\omega_0$), on rencontrerait une situation semblable à celle du § E-1-a du Chapitre XX. Deux types de processus à deux photons seraient alors à considérer, ceux où le photon 1 est absorbé en premier et le photon 2 en second, et ceux où les deux photons sont absorbés dans l'ordre inverse.

(le signe \sim signifie simplement que nous avons ignoré un facteur de phase sans conséquence), avec :

$$\delta^{(\Delta t)}(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin(E \Delta t/2\hbar)}{E} \quad (12)$$

La fonction $\delta^{(\Delta t)}$ tend vers une fonction delta lorsque $\Delta t \rightarrow \infty$, comme l'indique la relation (10) de l'Appendice II ; elle indique donc une conservation de l'énergie satisfaisant la condition (1), à $\hbar/\Delta t$ près. En revanche, le second terme dans le crochet de (10) introduit dans la somme sur t' une exponentielle $e^{i[E_b - E_c - \hbar\omega_i]t'}$ qui oscille rapidement en fonction de t' lorsque la condition (1) est satisfaite⁴ (exactement ou de façon approximative). Ce terme introduit une contribution non résonnante et donc négligeable. Nous reviendrons sur son sens physique (branchement soudain du couplage entre atome et champ) dans la Remarque (ii) ci-dessous. Pour le moment, nous l'ignorons simplement à cause de son caractère non résonnant, ce qui nous conduit à :

$$\langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(\Delta t, 0) | \psi_{\text{in}} \rangle = -2i\pi \frac{\langle \psi_{\text{fin}} | H_I | \psi_{\text{rel}} \rangle \langle \psi_{\text{rel}} | H_I | \psi_{\text{in}} \rangle}{E_a + \hbar\omega_i - E_c} \delta^{(\Delta t)}(E_b - E_a - 2\hbar\omega_i) \quad (13)$$

La comparaison avec la relation (B-10) du Chapitre XX montre une grande similarité entre l'amplitude de probabilité du processus d'absorption à un photon et celle d'une transition à deux photons. On passe de la première à la seconde en remplaçant la variable de la fonction $\delta^{(\Delta t)}$ par celle appropriée à la conservation de l'énergie à deux photons, écrite en (1), et en remplaçant l'élément de matrice $\langle \psi_{\text{fin}} | H_I | \psi_{\text{in}} \rangle$ par⁵ :

$$\frac{\langle \psi_{\text{fin}} | H_I | \psi_{\text{rel}} \rangle \langle \psi_{\text{rel}} | H_I | \psi_{\text{in}} \rangle}{E_{\text{in}} - E_{\text{rel}}} = \frac{\hbar\omega_i}{2\epsilon_0 L^3} \sqrt{n_i(n_i - 1)} \frac{\langle b | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{D} | c \rangle \langle c | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{D} | a \rangle}{E_a + \hbar\omega_i - E_c} \quad (14)$$

Dans la relation (B-6) du Chapitre XX qui donne l'amplitude de transition, il suffit donc de remplacer l'élément de matrice de H_I par un produit d'éléments de matrice divisé par une différence d'énergie.

Remarques

(i) Temps caractéristique de la transition intermédiaire

Le passage du système physique par état relais intermédiaire se fait sans conservation de l'énergie, puisqu'il implique une différence $\delta E = E_a + \hbar\omega_i - E_c$ avec l'énergie initiale. Mathématiquement, ceci se traduit par le fait que la seconde intégrale en temps de (9) contient un terme qui oscille d'autant plus rapidement que cette différence d'énergie est grande. Après intégration, cette intégrale conduit au crochet de (10), multiplié par la fraction qui le précède. Ce crochet part de zéro au temps $t' = 0$, puis oscille ensuite en fonction du temps intermédiaire t' . Au bout du temps $t' = \hbar/\delta E$, qui correspond à une période d'oscillation, sa valeur moyenne sur le

4. Dans ce cas $e^{i[E_b - E_c - \hbar\omega_i]t'} \simeq e^{i[E_b + E_a - 2E_c]t'/2}$, dont l'exposant est nécessairement grand puisque nous avons supposé que E_c est nettement différent de la demi-somme de E_a et E_b .

5. Nous utilisons l'expression de H_I fournie par (A-24) du Chapitre XX, ainsi que celle (A-27) du champ électrique.

temps vaut l'unité, c'est-à-dire précisément la valeur que nous avons retenue pour le calcul de l'amplitude de probabilité.

Le passage par l'état relais fait donc intervenir un temps caractéristique $\delta\tau = \hbar/\delta E$, au bout duquel l'intégrale sur le temps τ cesse de croître en module. Ce temps est d'autant plus court que l'écart par rapport à la conservation de l'énergie est important (on parle parfois de "transition virtuelle" pour décrire ce passage très court par un niveau intermédiaire). Le comportement de l'intégrale en τ est donc complètement différent de celui de l'intégrale sur t' , qui à résonance croît linéairement en temps comme l'indiquent (11) et (12); cette intégrale sur t' peut donc accumuler des contributions pendant des temps bien plus grands. La limitation des temps τ qui jouent un rôle dans l'amplitude de probabilité s'interprète naturellement dans le cadre de la relation d'incertitude temps-énergie de Heisenberg $\delta E \times \delta\tau \geq \hbar$.

(ii) Sens physique du terme qui a été ignoré dans l'amplitude de transition

Nous avons laissé de côté le second terme du crochet de la relation (10). Il est cependant intéressant de comprendre son origine, qui n'est autre que le branchement soudain de l'interaction entre l'atome et le rayonnement au temps $t = 0$ que nous avons supposé dans le calcul. Pour s'en convaincre, on peut utiliser un modèle où l'hamiltonien d'interaction H_I est remplacé par un opérateur $f(t)H_I$; la dépendance en temps de la fonction $f(t)$ permet d'introduire un branchement adiabatique du couplage. On vérifie alors que le terme que nous avons ignoré disparaît dans la limite d'un branchement très lent.

Une description plus rigoureuse peut être obtenue en construisant un paquet d'ondes du champ se propageant dans l'espace, et ne recouvrant l'atome que pendant un certain temps. Dans ce cas, l'hamiltonien d'interaction ne joue un rôle que pendant ce temps de recouvrement, même si l'opérateur lui-même est indépendant du temps. Pour un paquet d'ondes dont le front de montée est progressif, cette approche montrerait effectivement l'absence du terme que nous avons négligé.

Pour la probabilité de transition, le calcul est le même que pour une transition à un photon. Cette probabilité de transition $P_{a \rightarrow b}^{(2)}(t)$ est donnée par :

$$P_{a \rightarrow b}^{(2)}(t) = \left(\frac{\hbar\omega_i}{2\hbar\epsilon_0 L^3} \right)^2 [n_i(n_i - 1)] \left| \frac{\langle b | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{D} | c \rangle \langle c | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{D} | a \rangle}{E_a + \hbar\omega_i - E_c} \right|^2 \frac{4 \sin^2(\omega_0 - 2\omega_i) \Delta t / 2}{(\omega_0 - 2\omega_i)^2} \quad (15)$$

Elle est proportionnelle au carré $(\Delta t)^2$ pour les temps courts.

Enfin, si plusieurs niveaux relais interviennent dans la transition à deux photons, il convient de sommer les expressions (13) et (14) sur tous les états intermédiaires $|\psi_{\text{rel}}\rangle$ (et leurs énergies E_{rel}) possibles; dans le membre de droite de (14), cela revient à sommer sur les états atomiques intermédiaires accessibles c ainsi que leurs énergies E_c . Dans la probabilité (15) peuvent alors apparaître des effets d'interférence entre les amplitudes associées aux divers états intermédiaires c .

2. Rayonnement non monochromatique

Examinons maintenant ce qui se produit lorsque l'état initial du système $|\psi_{\text{in}}\rangle$ contient des photons de fréquences différentes. Nous allons voir que, comme pour les

transitions à un photon, les transitions à deux photons peuvent conduire à une probabilité de transition par unité de temps ; cependant, cette probabilité fait intervenir une fonction de corrélation d'ordre supérieur (ordre 4 au lieu de 2).

2-a. Amplitude de probabilité, probabilité

Le calcul de l'amplitude de transition est du même type que celui du § 1, et se base à nouveau sur l'expression de \bar{U} au deuxième ordre en H_I . Nous mènerons cependant le calcul de façon à mettre l'accent sur les propriétés des fonctions de corrélation temporelles du champ électrique incident. L'état initial du rayonnement est $|\phi_{\text{in}}^R\rangle$, son état final $|\phi_{\text{fin}}^R\rangle$, et $|\phi_{\text{rel}}^R\rangle$ est son état intermédiaire lorsque l'atome passe dans l'état relais c . La transition à deux photons est donc décrite par la suite d'états pour le système atome + photon :

$$|a; \phi_{\text{in}}^R\rangle \Rightarrow |c; \phi_{\text{rel}}^R\rangle \Rightarrow |b; \phi_{\text{fin}}^R\rangle \quad (16)$$

correspondant à l'amplitude de transition à l'ordre le plus bas :

$$\begin{aligned} \langle b; \phi_{\text{fin}}^R | \bar{U}(\Delta t, 0) | a; \phi_{\text{in}}^R \rangle &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_0^{\Delta t} dt' \langle b | \bar{D}(t') | c \rangle \cdot \langle \phi_{\text{fin}}^R | \bar{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{rel}}^R \rangle \\ &\times \int_0^{t'} dt'' \langle c | \bar{D}(t'') | a \rangle \cdot \langle \phi_{\text{rel}}^R | \bar{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t'') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \end{aligned} \quad (17)$$

(\mathbf{R} est la position de l'atome). Si nous posons, par analogie avec la relation (B-13) du Chapitre XX :

$$\begin{aligned} \langle c | \bar{D}(t) | a \rangle &= \mathcal{D}_{ca} e^{i(E_c - E_a)t/\hbar} & \text{avec : } \mathcal{D}_{ca} &= \mathcal{D}_{ca} \mathbf{e}_{ca} \\ \langle b | \bar{D}(t) | c \rangle &= \mathcal{D}_{bc} e^{i(E_b - E_c)t/\hbar} & \text{avec : } \mathcal{D}_{bc} &= \mathcal{D}_{bc} \mathbf{e}_{bc} \end{aligned} \quad (18)$$

nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle b; \phi_{\text{fin}}^R | \bar{U}(\Delta t, 0) | a; \phi_{\text{in}}^R \rangle &= \\ &- \frac{\mathcal{D}_{bc} \mathcal{D}_{ca}}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' e^{i(E_b - E_c)t'/\hbar} \langle \phi_{\text{fin}}^R | \mathbf{e}_{bc} \cdot \bar{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{rel}}^R \rangle \\ &\times \int_0^{t'} dt'' e^{i(E_c - E_a)t''/\hbar} \langle \phi_{\text{rel}}^R | \mathbf{e}_{ca} \cdot \bar{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t'') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \end{aligned} \quad (19)$$

L'expression (A-29) du Chapitre XX de l'opérateur champ électrique $\bar{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t)$ contient une somme de contributions de modes, chacune incluant l'exponentielle $e^{-i\omega_i t}$ associée à sa fréquence propre. Considérons la contribution du mode i dans $\bar{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t')$ et du mode j dans $\bar{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t'')$. Elle inclut l'intégrale sur les temps :

$$\int_0^{\Delta t} dt' e^{i(E_b - E_c)t'/\hbar} e^{-i\omega_i t'} \int_0^{t'} dt'' e^{i(E_c - E_a)t''/\hbar} e^{-i\omega_j t''} \quad (20)$$

dont l'exposant contient :

$$\begin{aligned} [E_b - E_c - \hbar\omega_i] t' + [E_c - E_a - \hbar\omega_j] t'' \\ = [E_b - E_a - \hbar\omega_i - \hbar\omega_j] t' + [E_c - E_a - \hbar\omega_j] (t'' - t') \end{aligned} \quad (21)$$

qui rappelle le résultat (8) obtenu pour une excitation monochromatique. On effectue alors un calcul semblable à celui du § 2, en supposant que le niveau relais c ne se trouve pas à mi-distance entre les niveaux a et b , et que la distribution en fréquences des photons incidents ne recouvre aucune résonance des transitions à un photon $a \leftrightarrow c$ et $c \leftrightarrow b$. Nous effectuons un changement de variable $\tau = t'' - t'$, et ne retenons dans l'intégrale sur τ que la contribution de sa borne supérieure, comme lors du passage de (10) à (13) :

$$\int_{-t'}^0 d\tau e^{i[E_c - E_a - \hbar\omega_i]\tau/\hbar} \Rightarrow \frac{i\hbar}{[E_a + \hbar\omega_j - E_c]} \quad (22)$$

(nous avons discuté dans la remarque (ii) à la fin du § 1 à quoi correspond la contribution de la borne inférieure, et pourquoi il est légitime de ne pas en tenir compte). De plus, nous supposons que la largeur du spectre de fréquences des photons incidents est faible devant le désaccord de résonance à un photon $E_a + \hbar\omega_i - E_c$, de sorte que ce dénominateur varie peu en valeur relative et peut être remplacé par la valeur constante $E_a + \hbar\omega_{ex} - E_c$, où $\omega_{ex}/2\pi$ est la fréquence centrale d'excitation. Nous notons Δ_{ac} l'écart à la résonance pour l'absorption d'un photon dans l'état intermédiaire :

$$\Delta_{ac} = \frac{E_a + \hbar\omega_{ex} - E_c}{\hbar} \quad (23)$$

Le remplacement de l'intégrale sur τ par i/Δ_{ac} laisse une exponentielle de la variable t' , d'argument $i[E_b - E_a - \hbar\omega_j - \hbar\omega_i]t'/\hbar$; chacune des sommations sur les modes i et j avec les exponentielles en $e^{-i\omega_{i,j}t'}$ reconstruit alors le champ électrique $\bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t')$, ce qui conduit à :

$$\begin{aligned} \langle b; \phi_{\text{fin}}^R | \bar{U}(\Delta t, 0) | a; \phi_{\text{in}}^R \rangle &= -\frac{i\mathcal{D}_{bc}\mathcal{D}_{ca}}{\hbar^2\Delta_{ac}} \\ &\int_0^{\Delta t} dt' e^{i\omega_0 t'/\hbar} \langle \phi_{\text{fin}}^R | \mathbf{e}_{bc} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{rel}}^R \rangle \langle \phi_{\text{rel}}^R | \mathbf{e}_{ca} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \end{aligned} \quad (24)$$

où ω_0 a été défini par $\omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$. Enfin la somme sur tous les états intermédiaires du rayonnement $|\phi_{\text{rel}}^R\rangle$ fait apparaître une relation de fermeture, et nous obtenons :

$$\begin{aligned} \sum_{|\phi_{\text{rel}}^R\rangle} \langle b; \phi_{\text{fin}}^R | \bar{U}(\Delta t, 0) | a; \phi_{\text{in}}^R \rangle &= -\frac{i\mathcal{D}_{bc}\mathcal{D}_{ca}}{\hbar^2\Delta_{ac}} \\ \int_0^{\Delta t} dt' e^{i\omega_0 t'/\hbar} \langle \phi_{\text{fin}}^R | \left[\mathbf{e}_{bc} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') \right] \left[\mathbf{e}_{ca} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') \right] | \phi_{\text{in}}^R \rangle \end{aligned} \quad (25)$$

Ce résultat est semblable à celui de la deuxième ligne de (B-14) du Chapitre XX régissant une transition à un photon, à condition d'effectuer la substitution :

$$\begin{aligned} &-\mathcal{D}(\phi_{\text{fin}}^R | \mathbf{e}_d \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{in}}^R) \\ &\Rightarrow \frac{\mathcal{D}_{bc}\mathcal{D}_{ca}}{\hbar\Delta_{ac}} \langle \phi_{\text{fin}}^R | \left[\mathbf{e}_{bc} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') \right] \left[\mathbf{e}_{ca} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') \right] | \phi_{\text{in}}^R \rangle \end{aligned} \quad (26)$$

A partir de là, le raisonnement est le même que pour une transition à un photon. Dans l'égalité (B-17) du Chapitre XX, il faut effectuer la substitution :

$$\begin{aligned}
 & G_R^N(t', t'') \\
 & \Rightarrow \langle \phi_{\text{in}}^R | \left[\mathbf{e}_{ca}^* \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t') \right] \left[\mathbf{e}_{bc}^* \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t') \right] \\
 & \times \left[\mathbf{e}_{bc} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t'') \right] \left[\mathbf{e}_{ca} \cdot \bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t'') \right] | \phi_{\text{in}}^R \rangle \quad (27)
 \end{aligned}$$

qu'il suffit ensuite de reporter dans (B-18) pour obtenir la probabilité de transition. Cette dernière contient donc la transformée de Fourier à la fréquence angulaire ω_0 de la transition atomique d'une fonction de corrélation du champ dans l'état initial qui contient quatre opérateurs champ (fonction de corrélation à 4 points). Cette fonction diffère en général d'un produit de fonctions de corrélations à deux opérateurs champ (celles qui déterminent les probabilités d'absorption d'un seul photon). Ainsi, la mesure des taux de transition à deux photons donne-t-elle accès, lors de sa mesure, à des caractéristiques du champ quantique qui sont indépendantes de celles intervenant pour un seul photon.

2-b. Probabilité par unité de temps pour un état de Fock du rayonnement

Supposons maintenant que le rayonnement soit initialement dans un état de Fock tel que celui écrit en (B-19) au Chapitre XX. Lorsqu'on remplace dans (25) les composantes à fréquences positives des champs électriques par leurs expressions (A-27) du Chapitre XX, seuls interviennent les modes peuplés dans l'état $|\phi_{\text{in}}^R\rangle$, puisque chaque opérateur d'annihilation donne un facteur égal à la racine carrée de la population initiale du mode; les autres modes donnent zéro. Considérons alors deux modes k_1 et k_2 initialement peuplés dans la source. Ils introduisent dans (25) deux contributions (Figure 2) : dans l'une (terme $i = k_1$ et $j = k_2$), c'est le photon k_1 qui est absorbé en premier pour porter l'atome du niveau fondamental au niveau relais, puis le photon k_2 qui complète la transition à deux photons en faisant aboutir l'atome au niveau b ; dans l'autre (terme $i = k_2$ et $j = k_1$), l'ordre des deux absorptions de photons est inversé. Ces contributions interfèrent dans la probabilité : une fois l'amplitude élevée en module au carré, ce sont en fait quatre termes qui proviennent de la contribution croisée des deux modes (auxquels s'ajoutent bien sûr deux contributions non croisées $i = j = k_{1,2}$ où un seul mode intervient).

Le raisonnement mené au § B-2-a du Chapitre XX, et résumé dans la Figure 1 de ce chapitre, se poursuit également sans autre changement. En supposant que la fonction de corrélation temporelle à 4 points du champ tend rapidement vers zéro lorsque $t'' - t'$ dépasse une valeur $1/\Delta\omega$ petite devant Δt , on peut montrer que la probabilité de transition est proportionnelle à Δt , et que la probabilité de transition par unité de temps à deux photons s'écrit :

$$\begin{aligned}
 W_{a \rightarrow b}^{(2)} &= \frac{P_{a \rightarrow b}^{(2)}(t)}{\Delta t} \\
 &= \frac{2\pi}{\hbar^2} \left(\frac{\mathcal{D}_{bc} \mathcal{D}_{ca}}{\hbar \Delta_{ac}} \right)^2 \frac{1}{4\varepsilon_0^2 L^6} \left[\sum_{i \neq j} 2 \langle n_i n_j \rangle + \sum_i \langle n_i (n_i - 1) \rangle \right] (\hbar\omega_i) (\hbar\omega_j) \\
 &\quad \times |(\mathbf{e}_{bc} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_i) (\mathbf{e}_{ca} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_j)|^2 \delta(\omega_i + \omega_j - \omega_0) \quad (28)
 \end{aligned}$$

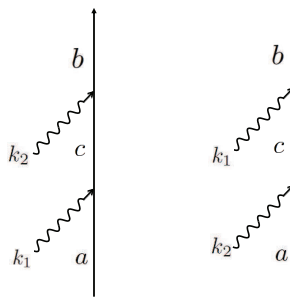


FIGURE 2 – Deux diagrammes intervenant pour une transition à deux photons avec une source multimode, où deux modes k_1 et k_2 sont initialement peuplés. Dans le premier (à gauche sur la figure), le photon k_1 est absorbé en premier, faisant passer (de façon non résonnante) l'atome du niveau initial a au niveau relais c ; puis le photon k_2 complète la transition (résonnante) à deux photons. Dans le second (à droite sur la figure), l'ordre des absorptions de photons k_1 et k_2 est inversé. Ces deux diagrammes décrivent des amplitudes de probabilité qui interfèrent dans la probabilité de transition à deux photons.

La fonction delta de cette expression exprime bien sûr la conservation de l'énergie totale : pour effectuer la transition atomique, il faut absorber deux photons dont la somme des énergies est celle de la transition. La probabilité contient les populations des photons qui satisfont à cette condition, comme on pouvait s'y attendre. Mais il faut bien noter que, pour $i \neq j$ (photons absorbés depuis deux modes différents), c'est la valeur moyenne $\langle n_i n_j \rangle$ du produit des populations des modes qui apparaît dans la probabilité de transition à deux photons, et non le produit des valeurs moyennes qui est a priori différent. Pour $i = j$ (deux photons absorbés depuis le même mode, comme au § 1), c'est la valeur moyenne $\langle n_i (n_i - 1) \rangle$; cette dernière s'annule si un seul photon est présent dans le mode, puisqu'un seul photon est incapable de produire une transition à deux photons.

Remarque : Il existe également des transitions à 3, ..., n photons, correspondant à la relation de conservation de l'énergie $E_b - E_a = n\hbar\omega_i$. Les taux de transition correspondants sont proportionnels à des fonctions de corrélation du champ d'ordre 6, ..., $2n$.

3. Discussion physique

Malgré la similarité entre les expressions des amplitudes de transition pour des processus d'absorption à un et deux photons, les seconds présentent un certain nombre de spécificités, que nous examinons maintenant.

3-a. Lois de conservation

$\alpha.$ Conservation de l'énergie totale

Comme nous l'avons vu, la fonction $\delta^{(\Delta t)}(E_b - E_a - 2\hbar\omega_i)$ apparaissant dans (13) exprime la conservation de l'énergie totale. Lorsque l'atome absorbe deux photons pour passer de l'état a à l'état b , son gain d'énergie $E_b - E_a$ est égal à la somme $2\hbar\omega_i$ des énergies des deux photons absorbés.

$\beta.$ Conservation de l'impulsion totale

Dans le calcul conduisant à l'amplitude de transition à deux photons, les variables externes ont été ignorées. Pour en tenir compte, il faut supposer que le centre de masse de l'atome est au point \mathbf{R} et garder les exponentielles $\exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R})$ apparaissant dans les opérateurs $\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{R})$ des deux hamiltoniens d'interaction H_I , exponentielles qui se multiplient pour donner un opérateur $\exp(2i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R})$. Il faut aussi introduire dans l'état initial et dans l'état final les nombres quantiques \mathbf{K}_{in} et \mathbf{K}_{fin} caractérisant les impulsions initiale et finale $\hbar\mathbf{K}_{\text{in}}$ et $\hbar\mathbf{K}_{\text{fin}}$ du centre de masse. On obtient alors dans l'amplitude de transition un terme supplémentaire :

$$\langle \mathbf{K}_{\text{fin}} | \exp(2i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}) | \mathbf{K}_{\text{in}} \rangle = \delta(\mathbf{K}_{\text{fin}} - \mathbf{K}_{\text{in}} - 2\mathbf{k}_i) \quad (29)$$

qui indique que l'impulsion de l'atome augmente de $2\hbar\mathbf{k}_i$ quand il absorbe deux photons.

Remarque :

Supposons que l'atome soit excité par deux faisceaux lumineux 1 et 2 de même fréquence ω_i se propageant dans des sens opposés. Les calculs précédents doivent alors être généralisés au cas où les deux photons absorbés par l'atome appartiennent, l'un au faisceau 1, l'autre au faisceau 2. Les impulsions $+\hbar\mathbf{k}_i$ et $-\hbar\mathbf{k}_i$ de ces deux photons sont alors opposées et l'impulsion totale gagnée par l'atome au cours de la transition est nulle. Comme l'effet Doppler et l'effet de recul sont liés à la variation de l'impulsion atomique lors de la transition (voir Complément A_{XIX}), on en déduit que la raie d'absorption à deux photons ne présente ni élargissement Doppler, ni déplacement de recul. Une telle situation est très intéressante pour la spectroscopie de haute résolution, par exemple pour la transition à deux photons reliant les états $1s$ et $2s$ de l'atome d'hydrogène.

$\gamma.$ Conservation du moment cinétique total et de la parité

L'expression (14) apparaissant dans l'amplitude d'absorption à deux photons est un produit de deux éléments de matrice d'une composante du dipôle électrique de l'atome – qui est un opérateur vectoriel – et d'un dénominateur d'énergie. Dans une rotation, cette expression se transforme donc comme un produit de deux vecteurs, puisque le dénominateur d'énergie est invariant par rotation. Des vecteurs sont des opérateurs tensoriels irréductibles (Complément G_X, exercice 8) d'ordre $K = 1$. En conséquence, l'expression (14) peut être décomposée⁶ en une somme de composantes

6. Le produit de deux opérateurs tensoriels irréductibles K et K' se décompose comme le produit de deux kets de moments cinétiques K et K' , et met donc en jeu des coefficients de Clebsch-

de moment cinétique total $F = 0, 1, 2$. L'utilisation du théorème de Wigner-Eckart (Complément E_X) permet alors de montrer que l'amplitude d'absorption à deux photons entre deux niveaux de nombres quantiques F, M et F', M' (où M et M' sont les composantes de \mathbf{F} sur l'axe Oz) n'est différente de zéro que si :

$$\begin{aligned} F - F' &= \pm 2, \pm 1, 0 \\ M - M' &= \pm 2, \pm 1, 0 \end{aligned} \quad (30)$$

Par ailleurs, l'opérateur dipôle électrique apparaissant dans (14) est un opérateur impair puisqu'il est proportionnel à l'opérateur position de l'électron. On en déduit que les états initial et final de la transition à deux photons doivent être de même parité, et de parité opposée à celle de l'état relais.

On peut appliquer ces règles de sélection à la transition $1s \leftrightarrow 2s$ de l'atome d'hydrogène, reliant deux états de même parité et de moment cinétique total différant au plus de ± 1 (on tient compte des spins $1/2$ de l'électron et du proton). Avec des transitions dipolaires électriques, une transition à deux photons $1s \leftrightarrow 2s$ est permise, alors qu'elle est interdite à un photon.

3-b. Cas où l'état relais devient résonnant pour l'absorption à un photon

Dans le dénominateur de l'expression (14), apparaît la différence :

$$\hbar\Delta_{ac} = E_a + \hbar\omega_i - E_c \quad (31)$$

entre l'énergie de l'état atomique a , augmentée de $\hbar\omega_i$, et l'énergie de l'état relais c . Si Δ_{ac} s'annule, il se produit une divergence de sorte que les expressions que nous avons obtenues perdent leur sens. Dans le calcul, nous avons explicitement supposé que le niveau intermédiaire n'est pas résonnant pour une absorption à un photon, de sorte que cette divergence ne doit pas se produire. Examinons pourtant à quoi correspondrait une annulation de Δ_{ac} . Comme la condition de résonance pour la transition à deux photons s'écrit $E_b = E_a + 2\hbar\omega_i$, la condition $\Delta_{ac} = 0$ signifierait que le niveau atomique⁷ relais c est exactement à mi-distance énergétique entre les niveaux atomiques initial et final a et b . On aurait donc une résonance à la fois pour un processus à deux photons et pour un processus à un seul photon, tous deux partant du niveau a .

Comment alors étudier le cas où Δ_{ac} est nul ou très petit, tout en évitant la divergence de l'amplitude d'absorption à deux photons ? Une méthode pour résoudre cette difficulté consiste à noter que l'état relais c est en général un état excité ayant une durée de vie τ_c finie, à cause de l'émission spontanée de photons à partir de cet état. Comme nous l'avons fait dans le § E-2 du Chapitre XX lors de l'étude de la diffusion résonnante d'un photon par un atome, où des divergences analogues apparaissent, on peut alors montrer qu'il est légitime de remplacer l'énergie E_c de l'état c

Gordan. Il s'ensuit, d'après les résultats généraux du chapitre X sur la composition des moments cinétiques, qu'un produit d'opérateurs tensoriels irréductibles se décompose en une somme d'autres opérateurs irréductibles d'ordre K'' , où K'' varie entre $|K - K'|$ et $K + K'$. Dans le cas particulier $K = K' = 1$, on obtient trois valeurs $F = 0, 1, 2$.

7. Nous supposons ici que l'état relais c est discret. S'il appartient à un continuum, la somme sur cet état relais c dans (14) devient une intégrale sur E_c . La fraction $1/(E_a + \hbar\omega_i + i\eta - E_c)$ s'exprime en fonction de $\delta(E_a + \hbar\omega_i - E_c)$ et $\mathcal{P}(1/(E_a + \hbar\omega_i - E_c))$ – où \mathcal{P} désigne la valeur principale de Cauchy – et donne, lors de l'intégration sur E_c , des fonctions de $E_{\text{in}} = E_a + 2\hbar\omega_i$ qui n'ont aucune raison de diverger au voisinage de $E_{\text{in}} \simeq E_{\text{fin}}$.

par $E_c - i\hbar(\Gamma_c/2)$, où $\Gamma_c = 1/\tau_c$ est la largeur naturelle du niveau c . Le dénominateur de l'amplitude de transition ne peut plus alors s'annuler et la divergence disparaît. Cependant, l'amplitude de transition varie de manière importante sur un intervalle de largeur Γ_c lorsque E_c varie au voisinage de $E_a + \hbar\omega_i$.

Le remplacement de E_c par $E_c - i(\hbar\Gamma_c/2)$ ne conduit à des résultats corrects que si les éléments de matrice $\langle c; n_i - 1 | H_I | a; n_i \rangle$ et $\langle b; n_i - 2 | H_I | c; n_i - 1 \rangle$, caractérisant le couplage du champ avec l'atome sur les transitions $c \leftrightarrow a$ et $b \leftrightarrow c$, sont petits devant $\hbar\Gamma_c$. Dans le cas contraire, il n'est plus possible de se limiter à l'ordre le plus bas vis-à-vis du champ. Il faut alors diagonaliser l'hamiltonien du système global atome + champ en se limitant au sous-espace \mathcal{E} des états dont les énergies en l'absence de couplage sont très proches les unes des autres⁸. Si aucun état relais n'est résonnant, le sous-espace \mathcal{E} a deux dimensions; il est engendré par les deux états $|a; n_i\rangle$ et $|b; n_i - 2\rangle$. S'il existe un état relais c qui est résonnant, il faut inclure l'état $|c; n_i - 1\rangle$ dans le sous-espace \mathcal{E} – qui acquiert alors trois dimensions. Pour étudier la dynamique du système, il faut alors diagonaliser la matrice :

$$\begin{pmatrix} E_a + n_i\hbar\omega_i & \langle a; n_i | H_I | c; n_i - 1 \rangle & 0 \\ \langle c; n_i - 1 | H_I | a; n_i \rangle & E_c + (n_i - 1)\hbar\omega_i & \langle c; n_i - 1 | H_I | b; n_i - 2 \rangle \\ 0 & \langle b; n_i - 2 | H_I | c; n_i - 1 \rangle & E_b + (n_i - 2)\hbar\omega_i \end{pmatrix} \quad (32)$$

On obtient ainsi un traitement général qui permet de prendre en compte simultanément les transitions à un et deux photons.

En conclusion de ce complément, les transitions à deux photons font intervenir un processus physique différent de ce que serait la simple succession de deux absorptions à un photon. Nous avons vu dans la discussion du § 1, et en particulier dans ses deux remarques, la différence qui existe entre un peuplement cumulatif au cours du temps de l'état final, avec conservation de l'énergie, et un passage transitoire dans un état relais intermédiaire ne pouvant durer qu'un temps $\Delta\tau$ très court, limité par le défaut d'énergie. Il est d'autre part remarquable que l'amplitude de transition à deux photons puisse se mettre sous une forme qui rappelle beaucoup celle d'une transition à un photon; le seul changement majeur est le remplacement de l'élément de matrice du premier ordre en interaction par un élément de matrice du second ordre, divisé par un défaut d'énergie dans l'état relais. Ces notions se transposent à des processus d'ordres plus élevés : on peut par des méthodes semblables évaluer des amplitudes de transitions à trois, quatre, etc. photons.

8. Une telle description des interactions atome-rayonnement est appelée "méthode de l'atome habillé" (voir par exemple le Chapitre VI de la référence [20]). Le Complément C_{XX} applique cette méthode au problème d'un atome à deux niveaux interagissant avec un champ intense. Les états propres de la restriction de l'hamiltonien global au sous-espace \mathcal{E} sont appelés les "états habillés".

Complément B_{XX}

Photo-ionisation

1	Brefs rappels sur l'effet photo-électrique	542
1-a	Interprétation en termes de photons	542
1-b	Photo-ionisation d'un atome	544
2	Calcul des taux de photo-ionisation	544
2-a	Cas d'un seul atome dans un rayonnement monochromatique	544
2-b	Rayonnement stationnaire non monochromatique	545
2-c	Rayonnement non stationnaire et non monochromatique	548
2-d	Corrélations entre les taux de photo-ionisation de deux atomes détecteurs	549
3	Une théorie quantique du rayonnement est-elle essentielle pour décrire la photo-ionisation ?	550
3-a	Expériences utilisant un seul atome photo-détecteur	550
3-b	Expériences utilisant deux atomes photo-détecteurs	551
4	Photo-ionisation à deux photons	556
4-a	Différences avec la photo-ionisation à un photon	556
4-b	Taux de photo-ionisation	557
4-c	Importance des fluctuations des valeurs de l'intensité du rayonnement	558
5	Ionisation tunnel avec des champs laser intenses	559

Les processus d'absorption, d'émission, et de diffusion de photons par un atome qui ont été étudiés au Chapitre XX s'effectuent entre deux états discrets de cet atome. Un atome possède cependant, en plus de ses états discrets, des continus d'énergie. Le plus directement accessible est le continuum d'ionisation simple, qui correspond à la perte d'un électron unique par l'atome (ionisation). Ce continuum commence à un seuil d'énergie E_I au-dessus de celle du niveau fondamental, et s'étend sur toutes les énergies supérieures à ce seuil. Nous appellerons "énergie d'ionisation" cette énergie E_I . Dans ce complément, nous nous proposons d'étudier le processus de "photo-ionisation" au cours duquel un rayonnement incident fait passer l'atome de son état fondamental vers un état situé dans le continuum d'ionisation.

Une fois qu'il a été porté dans le continuum d'ionisation, l'électron peut s'éloigner à une distance arbitraire de l'ion résiduel ; il en a donc été arraché par le rayonnement incident. Un tel processus rappelle l'effet photo-électrique au cours duquel le rayonnement arrache un électron d'un métal. C'est pourquoi nous commencerons au § 1 par quelques rappels sur l'effet photo-électrique, afin de souligner les analogies entre cet effet et la photo-ionisation.

Nous montrerons ensuite au § 2 comment la théorie quantique peut être utilisée pour calculer la probabilité par unité de temps pour qu'un atome soit photo-ionisé par un rayonnement incident. Nous supposons que le spectre du rayonnement

incident est entièrement situé au-dessus du seuil d'ionisation, de sorte qu'aucune absorption résonnante conduisant l'atome vers un niveau excité discret n'est possible. Dans le cas où un seul photo-détecteur D est utilisé (§ 2-a), les calculs sont très voisins de ceux exposés dans le Chapitre XX, les seules différences étant liées au caractère continu de l'état final de l'atome. Une autre situation intéressante est celle où deux atomes, placés dans le champ de rayonnement en \mathbf{R}_1 et \mathbf{R}_2 , représentent deux détecteurs D1 et D2; nous étudierons ensuite (§ 2-d) les corrélations entre les signaux qu'ils fournissent. Nous calculerons la probabilité par unité de temps d'observer une photo-ionisation en \mathbf{R}_1 à l'instant t_1 et une autre en \mathbf{R}_2 à l'instant t_2 .

On peut se poser la question de la nécessité d'une théorie quantique du rayonnement pour rendre compte quantitativement des processus de photo-ionisation. Serait-il suffisant d'utiliser une théorie semi-classique décrivant l'ionisation d'un ou plusieurs atomes quantiques par un rayonnement classique? En d'autres termes, pourrait-on expliquer l'effet photo-électrique "sans photons" [43]? Nous aborderons cette question dans le § 3.

L'atome peut également être photo-ionisé par absorption d'un nombre n de photons supérieur à l'unité. Ces processus sont appelés "*ionisation multiphotonique*" et jouent un rôle important dans les expériences utilisant des sources laser d'intensité élevée. Dans le § 4, nous donnerons une idée du calcul des taux de ces processus pour $n = 2$. Nous mentionnons enfin brièvement dans le § 5 un autre mécanisme d'ionisation des atomes, basé sur un effet tunnel, et apparaissant lorsque le champ électrique du rayonnement incident devient comparable au champ de Coulomb entre l'électron atomique et le noyau.

1. Brefs rappels sur l'effet photo-électrique

C'est en 1905 qu'Albert Einstein [41] introduisit pour la première fois en physique l'idée de "quantum de lumière", que nous appelons maintenant photon. Montrant qu'il existait une grande analogie entre certaines propriétés statistiques du rayonnement du corps noir et celles d'un gaz parfait de particules, Einstein avançait l'idée que le rayonnement était lui-même constitué de grains d'énergie $h\nu$. Après les succès de la théorie ondulatoire de la lumière, ce retour à une description corpusculaire semblait totalement irréaliste pour la plupart des physiciens de l'époque. Certes, la quantification de l'énergie avait été introduite quelques années plus tôt par Max Planck pour rendre compte de la répartition spectrale du rayonnement du corps noir, mais c'étaient les échanges d'énergie entre matière et rayonnement qui étaient quantifiés, et non le rayonnement lui-même.

1-a. Interprétation en termes de photons

Dans ce même article, Einstein appliquait l'idée de quantum de lumière pour donner une nouvelle description de l'effet photo-électrique. Cet effet consiste en l'éjection d'un électron d'un métal soumis à une irradiation lumineuse. Einstein considérait que l'énergie $h\nu$ d'un quantum de lumière du faisceau lumineux est absorbée par un électron du métal et lui permet de s'extraire de ce métal. Cette extraction nécessite une énergie au moins égale à l'énergie de liaison E_L de l'électron dans le métal. La fréquence ν du faisceau lumineux doit donc être supérieure à une valeur seuil

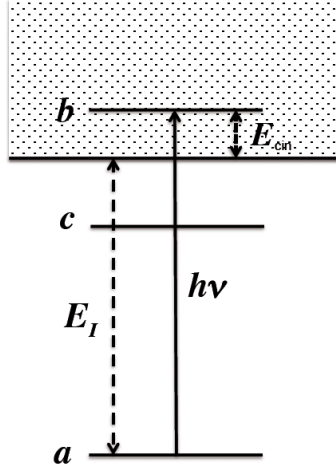


FIGURE 1 – Photo-ionisation d’un atome. L’état a est l’état fondamental, l’état c l’un des états discrets. Le continuum des états du spectre continu (continuum d’ionisation) s’étend à partir d’une distance E_I au-dessus de l’état fondamental. L’énergie E_I est appelée “énergie d’ionisation”. L’absorption par l’atome dans l’état a d’un photon de fréquence ν telle que $h\nu > E_I$ porte l’atome dans un état b appartenant au continuum d’ionisation. L’électron est éjecté avec une énergie cinétique E_{cin} égale à la différence entre $h\nu$ et E_I (lorsqu’il est suffisamment loin de l’ion formé après le départ de l’électron).

donnée par $h\nu = E_L$. Si $h\nu < E_L$, aucun électron ne peut être éjecté. Si $h\nu > E_L$, l’excédent d’énergie $h\nu - E_L$ est communiqué à l’électron sous forme d’énergie cinétique $E_{\text{cin}} = mv^2/2$. Cette interprétation conduit à l’équation d’Einstein :

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - E_L \quad \text{si } h\nu > E_L \tag{1}$$

donnant l’énergie cinétique de l’électron éjecté en fonction de ν . Elle implique en particulier que l’énergie cinétique de chaque électron ne dépend que de la fréquence du faisceau lumineux et non de son intensité¹(qui en revanche détermine le nombre d’électrons éjectés par unité de temps). L’équation (1) entraîne aussi que, si l’on varie ν et que l’on trace les variations de $mv^2/2$ en fonction de ν , on obtient une demi-droite de pente h partant du point d’abscisse E_L/h . Toutes ces prédictions susciterent un certain scepticisme et il fallut attendre plusieurs années (1913) avant que les travaux de R. Millikan et H. Fletcher sur l’effet photo-électrique apportent une confirmation expérimentale [42] des prédictions de l’équation (1).

1-b. Photo-ionisation d'un atome

La Figure 1 représente l'état fondamental a d'un atome, l'un des états c du spectre discret, et le continuum des états du spectre continu s'étendant à partir d'une distance E_I au-dessus de l'état fondamental. On choisit souvent l'origine des énergies au début du continuum. Les états du spectre discret ont alors une énergie négative. Les états du continuum à énergie positive sont dits "états de diffusion" où, bien qu'attiré encore par le noyau, l'électron ne lui demeure pas lié.

Considérons un atome dans l'état fondamental a . Un photon d'énergie $h\nu$ peut fournir de l'énergie à l'électron atomique de diverses manières. Si $h\nu < E_I$, ce photon ne peut être absorbé que si ν coïncide avec la fréquence $\nu_{ca} = (E_c - E_a)/h$ d'une transition reliant l'état a à un état c du spectre discret. C'est le processus d'absorption d'un photon entre deux états discrets déjà étudié dans le Chapitre XX. En revanche, si $h\nu > E_I$, l'atome peut toujours absorber le photon et aboutir dans un état du continuum. L'électron n'est plus lié et s'éloigne de l'ion formé après le départ de l'électron. Lorsque l'électron est suffisamment loin de l'ion pour que l'on puisse négliger leur énergie d'interaction coulombienne, son énergie cinétique est donnée par :

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - E_I \quad \text{si } h\nu > E_I \quad (2)$$

C'est le processus de photo-ionisation d'un atome. L'équation (2) est une généralisation pour un atome de l'équation (1) introduite par Einstein pour l'effet photo-électrique d'un métal.

2. Calcul des taux de photo-ionisation

Examinons maintenant comment les calculs du Chapitre XX doivent être adaptés pour s'appliquer au calcul d'un taux de photo-ionisation.

2-a. Cas d'un seul atome dans un rayonnement monochromatique

Nous partons de l'expression (B-7) du Chapitre XX donnant la probabilité pour que le système, partant à $t = 0$ de l'état initial $|\psi_{\text{in}}\rangle = |a; n_i\rangle$ (atome dans l'état a en présence de n_i photons dans le mode i , de fréquence angulaire ω_i), aboutisse à l'instant Δt dans l'état final $|\psi_{\text{fin}}\rangle = |b; n_i - 1\rangle$ (atome dans l'état b situé à une distance $\hbar\omega_0$ au-dessus de a avec un photon de moins dans le mode i) :

$$|\langle\psi_{\text{fin}}|\bar{U}(\Delta t, 0)|\psi_{\text{in}}\rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle\psi_{\text{fin}}|H_I|\psi_{\text{in}}\rangle|^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega_i)\Delta t/2]}{[(\omega_0 - \omega_i)/2]^2} \quad (3)$$

Dans le Chapitre XX, nous avons utilisé cette expression pour analyser le cas où les états a et b sont tous les deux des états discrets. Elle demeure cependant valable dans le cas où l'état b appartient à un continuum ; seule son interprétation change. Alors que la probabilité de trouver l'atome dans un état final discret b a un sens physique, pour un continuum, on doit calculer la probabilité de trouver l'atome dans

1. Une théorie classique conduirait plutôt à la prédiction que plus la lumière est intense, plus elle est susceptible de fournir de l'énergie à l'électron et de l'accélérer.

un intervalle d'énergie non nul. Il faut donc sommer la probabilité (3) sur les états b .

Quand b varie, $\omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$ varie, ainsi que l'élément de matrice de H_I . Mais, pour Δt suffisamment grand, la variation de l'élément de matrice de H_I est beaucoup plus lente que celle de la fraction du second membre de (3); cette dernière est en effet le carré d'une fonction de diffraction, atteignant un maximum égal à Δt^2 pour $\omega_0 = \omega_i$ et ayant une largeur de l'ordre de $1/\Delta t$. L'aire sous cette fonction est donc de l'ordre de $\Delta t^2 \times (1/\Delta t) = \Delta t$. Comparée à des fonctions de ω_0 variant lentement sur un intervalle de l'ordre de $1/\Delta t$, cette fonction se comporte donc, à un facteur de proportionnalité près, comme le produit $\Delta t \delta(\omega_0 - \omega_i)$. Il s'ensuit que la somme sur b de (3) est proportionnelle à Δt , de sorte qu'il est possible de définir pour l'atome une probabilité par unité de temps d'arriver dans le continuum, c'est-à-dire un taux de photo-ionisation.

Le coefficient de proportionnalité entre la fonction de diffraction et une fonction delta est donné par la relation (11) de l'Appendice II, qui indique que :

$$\lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 [(\omega_0 - \omega_i)\Delta t/2]}{[(\omega_0 - \omega_i)/2]^2} = \pi \Delta t \delta\left(\frac{\omega_0 - \omega_i}{2}\right) = 2\pi\hbar \Delta t \delta(E_b - E_a - \hbar\omega_i) \quad (4)$$

En reportant (4) dans (3), en sommant sur b et en divisant par Δt , on obtient finalement pour le taux de photo-ionisation :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \sum_b |\langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(\Delta t, 0) | \psi_{\text{in}} \rangle|^2 &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_b |\langle \psi_{\text{fin}} | H_I | \psi_{\text{in}} \rangle|^2 \delta(E_b - E_a - \hbar\omega_i) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \underbrace{|\langle \psi_{\text{fin}} | H_I | \psi_{\text{in}} \rangle|^2}_{E_b = E_a + \hbar\omega_i} \rho(E_a + \hbar\omega_i) \end{aligned} \quad (5)$$

où $\rho(E_a + \hbar\omega_i)$ est la densité d'états dans le continuum au voisinage de l'énergie $E_a + \hbar\omega_i$. Cette expression n'est autre que le résultat de la règle d'or de Fermi appliquée au couplage entre l'état discret $|a; n_i\rangle$ et le continuum $|b; n_i - 1\rangle$. Elle rappelle aussi beaucoup l'expression (C-37) du Chapitre XIII donnant la probabilité de transition par unité de temps entre un état atomique discret et un continuum, lorsque l'excitation est induite par une onde classique décrite par une fonction sinusoïdale du temps. Nous reviendrons sur ce point dans le § 3.

2-b. Rayonnement stationnaire non monochromatique

Nous considérons maintenant un seul atome interagissant avec un rayonnement non monochromatique ayant une distribution de fréquences caractérisée par la densité spectrale $I(\omega)$. Nous commencerons par supposer que les propriétés statistiques sont invariantes par translation dans le temps. Puis, dans le § 2-c suivant, nous étudierons le cas d'un rayonnement non stationnaire.

α . Fonctions de corrélation du dipôle atomique et du champ

Dans le § D-1 du Chapitre XX, nous avons établi l'expression donnant la probabilité de transition $\sum_b P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t)$ pour que, par absorption d'un photon, l'atome passe au bout d'un temps Δt de l'état a vers un état quelconque b autre que a . Cette probabilité apparaît dans la relation (D-4) de ce chapitre comme une double

intégrale d'une somme de produits de fonctions de corrélation du dipôle atomique et du champ.

Commençons par étudier les fonctions de corrélation du dipôle atomique. Comme dans les relations (B-13) et (C-1) du Chapitre XX, nous écrivons les éléments de matrice de ce dipôle en point de vue de Heisenberg sous la forme :

$$\langle b|\bar{\mathbf{D}}(t')|a\rangle = \langle b|\mathbf{D}|a\rangle e^{i\omega_{ba}t'} = \mathcal{D}_{ba} e^{i\omega_{ba}t'} \quad (6)$$

avec :

$$\mathcal{D}_{ba} = \mathcal{D}_{ba} \mathbf{e}_d \quad (7)$$

où \mathbf{e}_d est le vecteur unitaire parallèle au vecteur $\langle b|\mathbf{D}|a\rangle$. Pour simplifier les calculs, nous supposons que ce vecteur est le même pour tous les états b .

Remarque :

A priori, le vecteur \mathbf{e}_d n'est pas le même pour tous les états b qui sont reliés à a par les éléments de matrice de \mathbf{D} . La direction de ce vecteur dépend en fait des propriétés de symétrie de rotation des deux états². On peut donc classer les différents états b par catégories de même symétrie pour lesquels cette direction reste constante, ce qui permet d'effectuer les calculs comme ci-dessous. Une fois les calculs terminés, il est facile d'ajouter les probabilités d'ionisation associées à chacune des catégories d'états excités.

Cette hypothèse sur \mathbf{e}_d entraîne que, comme dans le § B-2-a- α , seules les composantes des champs $E^{(+)}$ (et $E^{(-)}$) sur \mathbf{e}_d (et \mathbf{e}_d^*) apparaissent dans les fonctions de corrélation du champ puisque le champ apparaît toujours dans un produit scalaire avec \mathbf{D} .

Un seul produit de fonctions de corrélation (au lieu de 9) apparaît alors dans l'expression de $\sum_b P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t)$ qui s'écrit :

$$\sum_b P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{\Delta t} dt'' G_A(t' - t'') G_R^N(t' - t'') \quad (8)$$

où :

$$\begin{aligned} G_A(t' - t'') &= \langle a| [\mathbf{e}_d^* \cdot \bar{\mathbf{D}}(t')] [\mathbf{e}_d \cdot \bar{\mathbf{D}}(t'')] |a\rangle \\ &= \sum_b |\mathcal{D}_{ba}|^2 e^{i\omega_{ba}(t' - t'')} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} G_R^N(t' - t'') &= \langle \phi_{\text{in}}^R | [\mathbf{e}_d^* \cdot \bar{\mathbf{E}}^{(-)}(\mathbf{R}, t')] [\mathbf{e}_d \cdot \bar{\mathbf{E}}^{(+)}(\mathbf{R}, t'')] | \phi_{\text{in}}^R \rangle \\ &= \langle \phi_{\text{in}}^R | \bar{\mathbf{E}}_d^{(-)}(\mathbf{R}, t') \bar{\mathbf{E}}_d^{(+)}(\mathbf{R}, t'') | \phi_{\text{in}}^R \rangle \end{aligned} \quad (10)$$

2. L'état fondamental a est un vecteur propre de la composante du moment cinétique le long de l'axe de quantification Oz de valeur propre $m_a \hbar$; pour l'état b , la valeur propre est $m_b \hbar$. La transition entre a et b correspond alors à une variation $\Delta m = m_a - m_b$. Si $\Delta m = 0$, on peut montrer par symétrie que \mathbf{e}_d est parallèle à Oz ; si $\Delta m = \pm 1$, il est contenu dans le plan perpendiculaire $\mathbf{e}_d = (\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2}$.

Dans cette dernière égalité, $|\phi_{\text{in}}^R\rangle$ est l'état initial du rayonnement. Comme cet état est stationnaire, ses propriétés sont invariantes par translation dans le temps, de sorte que la fonction de corrélation ne dépend que de la différence $t' - t''$.

La fonction de corrélation atomique (9) peut encore être écrite :

$$G_A(t' - t'') = \int d\omega \bar{G}_A(\omega) e^{i\omega(t' - t'')} \quad (11)$$

où :

$$\bar{G}_A(\omega) = \sum_b |e_d \cdot \mathcal{D}_{ba}|^2 \delta(\omega - \omega_{ba}) \quad (12)$$

La quantité $\bar{G}_A(\omega)$ représente la sensibilité spectrale de l'atome photo-détecteur, c'est-à-dire la variation avec ω des intensités de transitions reliant l'état fondamental a à un niveau b du continuum d'ionisation situé à une distance $\hbar\omega$ au-dessus de a . Nous supposons ici que la largeur $\Delta\omega_A$ de la fonction $\bar{G}_A(\omega)$ est beaucoup plus grande que la largeur spectrale $\Delta\omega_R$ du rayonnement incident.

$$\Delta\omega_A \gg \Delta\omega_R \quad (13)$$

Une telle condition définit ce que nous appellerons un "photo-détecteur à bande large".

La fonction de corrélation du champ (9) a déjà été calculée dans le § B-2-a- β du Chapitre XX dans le cas où l'état initial du rayonnement est un état de Fock $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$, ou un mélange statistique de tels états avec des poids $p(n_1, \dots, n_i, \dots)$ – cf. équations (B-20) et (B-21) du Chapitre XX. Nous supposons que ce calcul s'applique également au problème étudié ici (rayonnement non monochromatique et stationnaire).

β . Taux de photo-ionisation

Pour transformer l'équation (8), il est utile d'étudier plus en détail la dépendance en $t' - t''$ de $G_R^N(t' - t'')$. La distribution spectrale du rayonnement incident est centrée autour d'une valeur non nulle, $\bar{\omega}$, puisque nous supposons qu'elle est entièrement située au-dessus du seuil d'ionisation. On peut donc écrire :

$$G_R^N(t' - t'') = e^{-i\bar{\omega}(t' - t'')} C_R^N(t' - t'') \quad (14)$$

où $C_R^N(t' - t'')$ est une fonction "enveloppe" dont la transformée de Fourier est une fonction centrée en $\omega = 0$ et de largeur $\Delta\omega_R$. Cette fonction enveloppe varie donc très lentement sur des intervalles de temps petits³ devant $1/\Delta\omega_R$. Pour $t' = t''$, c'est-à-dire $t' - t'' = 0$, l'équation (14) entraîne que :

$$\begin{aligned} C_R^N(0) &= G_R^N(0) \\ &= \langle \phi_{\text{in}}^R | \bar{E}_d^{(-)}(\mathbf{R}, t') \bar{E}_d^{(+)}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{in}}^R \rangle = I \end{aligned} \quad (15)$$

où I est l'intensité du rayonnement (indépendante du temps puisque l'état choisi pour le rayonnement est stationnaire). Nous verrons dans le paragraphe suivant comment généraliser les résultats obtenus à un rayonnement non stationnaire.

3. Ce n'est pas le cas de $G_R^N(t' - t'')$ à cause de l'exponentielle $e^{-i\bar{\omega}(t' - t'')}$ qui peut varier beaucoup sur des intervalles de temps $1/\Delta\omega_R$ puisque $\bar{\omega} \gg \Delta\omega_R$.

Revenons à la double intégrale de (8) et supposons que l'intervalle d'intégration Δt satisfasse la condition $\Delta t \gg \tau_{CA}$ où $\tau_{CA} = 1/\Delta\omega_A$ est le temps de corrélation du détecteur. Dans le plan t', t'' , la fonction à intégrer dans (8) n'est alors différente de 0 que dans un ruban autour de la diagonale principale (Figure 1 du Chapitre XX), de largeur τ_{CA} très étroite devant Δt . Si l'on passe des variables d'intégration t' et t'' aux variables t' et $\tau = t' - t''$, on peut donc négliger la variation de $C_R^N(\tau)$ puisque, d'après (13), $\tau_{CA} \ll 1/\Delta\omega_R$, et utiliser (15) pour ré-écrire (14) sous la forme :

$$\begin{aligned} G_R^N(t' - t'') &= e^{-i\bar{\omega}(t' - t'')} C_R^N(t' - t'') \\ &\simeq e^{-i\bar{\omega}(t' - t'')} C_R^N(0) = I e^{-i\bar{\omega}(t' - t'')} \end{aligned} \quad (16)$$

Dans (8), effectuons le changement de variables $\tau = t' - t''$. Avec l'expression (16) de $G_R^N(t' - t'')$, l'intégrale sur t' d'une fonction qui est devenue indépendante de cette variable introduit alors un simple facteur Δt . Reste l'intégrale sur τ qui conduit à :

$$\sum_b P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t) = \frac{1}{\hbar^2} I \Delta t \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-i\bar{\omega}\tau} G_A(\tau)}_{=2\pi \bar{G}_A(\bar{\omega})} \quad (17)$$

Comme cette probabilité est proportionnelle à Δt , on peut définir un taux de photo-ionisation :

$$W_{\text{phot.}} = \frac{1}{\Delta t} \sum_b P_{a \rightarrow b}^{\text{abs}}(\Delta t) = \frac{2\pi}{\hbar^2} I \bar{G}_A(\bar{\omega}) \quad (18)$$

Ce taux est proportionnel à l'intensité incidente I et à la sensibilité spectrale du photo-détecteur $\bar{G}_A(\bar{\omega})$, évaluée à la fréquence centrale $\bar{\omega}$ du rayonnement.

2-c. Rayonnement non stationnaire et non monochromatique

Pour un rayonnement non stationnaire, l'état initial du rayonnement n'est alors plus un état de Fock ou un mélange statistique d'états de Fock ; c'est plutôt une superposition linéaire de tels états, donnant naissance à des paquets d'ondes du type de ceux décrits dans le Complément E_{XX}. La fonction de corrélation du rayonnement $G_R^N(t', t'')$ n'est plus alors une fonction de la seule variable $t' - t''$, mais dépend à la fois de t' et t'' . On peut toujours supposer que les fréquences apparaissant dans $G_R^N(t', t'')$ sont centrées autour de $\bar{\omega}$ dans un intervalle de largeur $\Delta\omega_R$, ce qui permet de généraliser les expressions (14) et (15) sous la forme :

$$G_R^N(t', t'') = e^{-i\bar{\omega}(t' - t'')} C_R^N(t', t'') \quad (19)$$

et :

$$G_R^N(t', t') = \langle \phi_{\text{in}}^R | E_z^{(-)}(\mathbf{R}, t') E_z^{(+)}(\mathbf{R}, t') | \phi_{\text{in}}^R \rangle = C_R^N(t', t') = I(\mathbf{R}, t') \quad (20)$$

où $I(\mathbf{R}, t')$ est l'intensité au point \mathbf{R} et à l'instant t' .

Si l'on utilise les développements en a_i et a_i^\dagger des opérateurs champs figurant dans (10), on obtient une expression de $G_R^N(t', t'')$ qui généralise l'équation (B-20)

du Chapitre XX à des champs non stationnaires :

$$G_R^N(t', t'') = \sum_i \sum_j \frac{\hbar \sqrt{\omega_i \omega_j}}{2\varepsilon_0 L^3} (\mathbf{e}_d^* \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_j^*)(\mathbf{e}_d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_i) \langle \phi_{\text{in}}^R | a_j^\dagger a_i | \phi_{\text{in}}^R \rangle e^{-i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{R} - \omega_j t'')} e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R} - \omega_i t')} \quad (21)$$

Lorsqu'on fixe \mathbf{k}_j et ω_j , la somme sur i de (21) représente un paquet d'ondes, de fréquence centrale $\bar{\omega}$ et dont l'enveloppe défile au point \mathbf{R} en un temps de l'ordre de $1/\Delta\omega_R$. Si t' varie sur un intervalle $\Delta t \ll 1/\Delta\omega_R$, la variation de l'enveloppe peut être négligée. Des conclusions analogues sont valables pour la somme sur j de (21) pour des valeurs fixées de \mathbf{k}_i et ω_i .

Revenons alors à la double intégrale de (8). Comme les phénomènes varient maintenant avec t , l'intervalle d'intégration sera pris entre t et $t + \Delta t$ et non plus entre 0 et Δt . Supposons que Δt satisfasse à la condition :

$$\frac{1}{\Delta\omega_A} \ll \Delta t \ll \frac{1}{\Delta\omega_R} \quad (22)$$

ce qui est possible, compte tenu de (13). On peut alors, puisque $\Delta t \ll 1/\Delta\omega_R$, négliger dans (19) la variation de $C_R^N(t', t'')$ quand t' et t'' varient dans le domaine d'intégration ; nous remplaçons donc $C_R^N(t', t'')$ par :

$$C_R^N(t, t) = \langle \phi_{\text{in}}^R | E_z^{(-)}(\mathbf{R}, t) E_z^{(+)}(\mathbf{R}, t) | \phi_{\text{in}}^R \rangle = I(\mathbf{R}, t) \quad (23)$$

Si nous reportons cette égalité dans (19) nous obtenons, dans l'intervalle d'intégration entre t et $t + \Delta t$:

$$G_R^N(t', t'') = e^{-i\bar{\omega}(t' - t'')} I(\mathbf{R}, t) \quad (24)$$

Les calculs sont alors très analogues à ceux déjà faits plus haut pour un champ stationnaire : l'intégrale sur t' fait apparaître un terme Δt ; l'intégrale sur $\tau = t' - t''$ est égale à :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-i\bar{\omega}\tau} G_A(\tau) = 2\pi \bar{G}_A(\bar{\omega}) \quad (25)$$

Appelons $W_I(\mathbf{R}, t)\Delta t$ la probabilité pour qu'un atome photo-détecteur placé en \mathbf{R} subisse une photo-ionisation entre les instants t et $t + \Delta t$. Nous aboutissons au résultat :

$$W_I(\mathbf{R}, t) = s \langle \phi_{\text{in}}^R | E_z^{(-)}(\mathbf{R}, t) E_z^{(+)}(\mathbf{R}, t) | \phi_{\text{in}}^R \rangle \quad (26)$$

où $s = 2\pi \bar{G}_A(\bar{\omega})/\hbar^2$ est un facteur caractérisant la sensibilité du photo-détecteur à la fréquence centrale $\bar{\omega}$ du rayonnement. Le taux de photo-ionisation de l'atome est donc un signal qui suit constamment les variations temporelles de l'intensité du rayonnement incident, écrite en (20).

2-d. Corrélations entre les taux de photo-ionisation de deux atomes détecteurs

Les calculs précédents peuvent être généralisés pour analyser d'autres expériences où deux atomes photo-détecteurs sont placés en \mathbf{R}_1 et \mathbf{R}_2 et où l'on étudie les

corrélations entre les photo-ionisations observées sur ces deux atomes aux instants t_1 et t_2 . De façon plus précise, soit $W_{II}(\mathbf{R}_2, t_2; \mathbf{R}_1, t_1)\Delta t_1\Delta t_2$ la probabilité de détecter une photo-ionisation en \mathbf{R}_1 entre t_1 et $t_1 + \Delta t_1$ et une autre photo-ionisation en \mathbf{R}_2 entre t_2 et $t_2 + \Delta t_2$. Des calculs très voisins de ceux qui précèdent, et que nous ne développerons pas ici, permettent de montrer (pour plus de détails, voir le Complément A_{II} de [20]) que :

$$W_{II}(\mathbf{R}_2, t_2; \mathbf{R}_1, t_1) = s^2 \langle \phi_{\text{in}}^R | \mathbf{E}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}_1, t_1) \mathbf{E}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}_2, t_2) \mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}_2, t_2) \mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}_1, t_1) | \phi_{\text{in}}^R \rangle \quad (27)$$

On peut aisément comprendre pourquoi deux opérateurs $\mathbf{E}_{\perp}^{(+)}$ précédés de deux opérateurs $\mathbf{E}_{\perp}^{(-)}$ apparaissent dans (27). Le taux de photo-ionisation double W_{II} est en effet calculé à partir d'une probabilité qui est le carré du module d'une amplitude pour qu'un photon soit absorbé en \mathbf{R}_1, t_1 et un autre en \mathbf{R}_2, t_2 . Cette amplitude doit donc contenir un produit de deux opérateurs $\mathbf{E}_{\perp}^{(+)}$. L'amplitude conjuguée doit contenir deux opérateurs $\mathbf{E}_{\perp}^{(-)}$ rangés dans l'ordre inverse. Il n'est donc pas surprenant de voir dans (27) deux opérateurs $\mathbf{E}_{\perp}^{(-)}$ suivis de deux opérateurs $\mathbf{E}_{\perp}^{(+)}$ avec des ordres différents de \mathbf{R}_1, t_1 et \mathbf{R}_2, t_2 .

Il existe une grande analogie entre les deux taux de photo-ionisation simple et double W_I et W_{II} donnés par les équations (26) et (27) et les fonctions de corrélation G_1 et G_2 étudiées au Chapitre XVI et donnant les densités de probabilité de trouver une particule en \mathbf{r}_1, t_1 pour G_1 , ou une particule en \mathbf{r}_1, t_1 et une autre en \mathbf{r}_2, t_2 pour G_2 . Notons cependant que pour G_1 et G_2 , on parle de la probabilité de présence d'une ou deux particules en des points donnés, alors qu'ici il s'agit de probabilité de photo-ionisation d'atomes placés en des points donnés. Les opérateurs champ apparaissant dans (26) et (27) sont les composantes de fréquence positive et négative du champ électrique, puisque ce sont ces opérateurs qui décrivent l'absorption et l'émission de photons.

3. Une théorie quantique du rayonnement est-elle essentielle pour décrire la photo-ionisation ?

Dans un traitement semi-classique de la photo-ionisation, le champ de rayonnement est décrit comme un champ classique, alors que l'atome est décrit quantiquement. Le couplage atome-champ est alors une perturbation dépendant du temps pouvant induire des transitions entre un état discret de l'atome, par exemple l'état fondamental a , et un état b appartenant au continuum d'ionisation. Un tel traitement peut-il donner des résultats identiques à ceux d'un traitement quantique ? Nous allons voir que c'est souvent le cas, mais pas toujours.

3-a. Expériences utilisant un seul atome photo-détecteur

Dans le cas simple où le champ classique est oscillant et monochromatique, de fréquence ω_i , la probabilité de transition par unité de temps peut être mise sous une forme qui rappelle la règle d'or de Fermi valable pour une perturbation constante couplant un état discret à un continuum⁴.

4. Voir par exemple le § C-3 du Chapitre XIII, en particulier la relation (C.37).

Dans le cas plus général où le champ classique n'est pas monochromatique, on peut reprendre la même suite de calculs qui conduit à l'équation (8), et montrer que la probabilité de transition de l'état discret a vers un état quelconque du continuum s'exprime encore sous forme de l'intégrale du produit de deux fonctions de corrélation : l'une, $G_A(t' - t'')$, pour le dipôle atomique, l'autre, $G_R(t' - t'')$, pour le rayonnement. Dans les deux cas, le champ n'apparaît donc dans la probabilité de transition que par l'intermédiaire d'une fonction de corrélation. Dans le cas classique, la valeur moyenne quantique (10) est remplacée par le produit des composantes de fréquence négative et positive du champ classique :

$$\mathcal{G}_R^N(t' - t'') = \mathcal{E}_d^{(-)}(\mathbf{R}, t')\mathcal{E}_d^{(+)}(\mathbf{R}, t'') \quad (28)$$

Dans cette relation, pour bien distinguer les champs quantiques des champs classiques, nous notons ces derniers avec des lettres rondes ; l'indice d signifie que le champ a été projeté sur le vecteur unitaire de polarisation défini en (7).

L'expression (28) est obtenue pour un champ classique parfaitement connu. Mais il se peut également que le champ classique ne soit connu que de manière probabiliste, comme un mélange statistique classique de champs avec certaines probabilités. La probabilité de transition donnée par (8), où la fonction de corrélation $\bar{G}_R^N(t' - t'')$ est remplacée par $\mathcal{G}_R^N(t' - t'')$, doit alors être moyennée sur tous les états du mélange statistique, ce qui revient à remplacer (28) par :

$$\mathcal{G}_R^N(t' - t'') = \overline{\mathcal{E}_d^{(-)}(\mathbf{R}, t')\mathcal{E}_d^{(+)}(\mathbf{R}, t'')} \quad (29)$$

où la barre au-dessus du produit des deux champs symbolise la moyenne statistique.

Il apparaît ainsi que, pour tous les signaux ne faisant intervenir qu'un seul atome photo-détecteur, les prédictions quantiques sont identiques à celles d'une théorie semi-classique utilisant un champ classique ayant la même fonction de corrélation que le champ quantique. En particulier, si le champ est stationnaire, la transformée de Fourier de la fonction de corrélation du champ n'est autre que la distribution spectrale $I_R(\omega)$ de ce champ. Pour un champ quantique, cette propriété a été démontrée dans le Chapitre XX – cf. relation (B-20). Pour un champ classique, elle résulte du théorème de Wiener-Khintchine. On en déduit que la probabilité de photo-ionisation d'un atome est la même, qu'on la calcule pour un champ quantique ou pour un champ classique, tous deux stationnaires ayant la même distribution spectrale.

Remarque

L'équivalence des prédictions des deux théories est également valable pour un champ qui n'est pas stationnaire. La théorie semi-classique prédit en effet que le taux de photo-ionisation à l'instant t' est proportionnel à l'intensité du champ classique $\mathcal{E}_d^{(-)}(\mathbf{R}, t')\mathcal{E}_d^{(+)}(\mathbf{R}, t')$, qui dépend maintenant de t' puisque le champ est supposé non stationnaire. Nous verrons dans le Complément E_{XX} qu'un résultat analogue est obtenu en théorie quantique : la probabilité de photo-ionisation à l'instant t' d'un atome par un paquet d'ondes à un photon qui arrive sur lui est, elle aussi, donnée par le carré du module d'une fonction ; nous discuterons également dans quelle mesure cette fonction peut être assimilée à la fonction d'onde du photon au temps t' .

3-b. Expériences utilisant deux atomes photo-détecteurs

Pour un champ classique, la même suite de calculs qui conduit à l'équation (27) peut être répétée. Elle conduit à une expression analogue à (27), où la fonction

de corrélation quantique du champ, est remplacée par la moyenne statistique du produit de deux composantes de fréquence négative et deux composantes de fréquence positive du champ classique :

$$\overline{\mathcal{E}_d^{(-)}(\mathbf{R}_1, t_1)\mathcal{E}_d^{(-)}(\mathbf{R}_2, t_2)\mathcal{E}_d^{(+)}(\mathbf{R}_2, t_2)\mathcal{E}_d^{(+)}(\mathbf{R}_1, t_1)} \quad (30)$$

Comme les champs classiques commutent entre eux, l'expression (30) peut également être écrite sous la forme :

$$\overline{\mathcal{I}(\mathbf{R}_1, t_1)\mathcal{I}(\mathbf{R}_2, t_2)} \quad (31)$$

où :

$$\mathcal{I}(\mathbf{R}_1, t_1) = \mathcal{E}_d^{(-)}(\mathbf{R}_1, t_1)\mathcal{E}_d^{(+)}(\mathbf{R}_1, t_1) \quad (32)$$

est l'intensité du champ classique au point \mathbf{R}_1 à l'instant t_1 , et avec une équation analogue pour $\mathcal{I}(\mathbf{R}_2, t_2)$. Les corrélations entre les taux de photo-ionisation de deux atomes photo-détecteurs s'expriment donc, en théorie semi-classique, en fonction du produit des intensités arrivant sur les deux photo-détecteurs. La fonction de corrélation de l'amplitude du champ est remplacée par la fonction de corrélation de l'intensité.

Comparons maintenant ces résultats à ceux d'un traitement quantique, afin de voir quand ils diffèrent.

α. Quelques situations où un traitement semi-classique est suffisant

Une première situation où les prédictions quantique et semi-classique coïncident est celle où l'état du champ est un état cohérent $|\{\alpha_i\}\rangle$ décrit par l'ensemble de variables normales classiques $\{\alpha_i\}$. Chaque mode i est dans un état cohérent $|\alpha_i\rangle$, de sorte que l'état $|\{\alpha_i\}\rangle$ est un ket propre de l'opérateur $\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{R}, t)$ avec une valeur propre $\mathcal{E}^{(+)}(\{\alpha_i\}, \mathbf{R}, t)$ égale au champ classique correspondant à l'ensemble de variables normales classiques $\{\alpha_i\}$. De même, le bra $\langle\{\alpha_i\}|$ est un bra propre de $\mathbf{E}^{(-)}(\mathbf{R}, t)$ avec une valeur propre $\mathcal{E}^{(-)}(\{\alpha_i\}, \mathbf{R}, t)$. Le taux W_{II} écrit en (27) devient donc pour un état cohérent du champ égal à :

$$\begin{aligned} W_{II}(\mathbf{R}_2, t_2; \mathbf{R}_1, t_1) &= s^2 \langle\{\alpha_i\}| \mathbf{E}_\perp^{(-)}(\mathbf{R}_1, t_1) \mathbf{E}_\perp^{(-)}(\mathbf{R}_2, t_2) \mathbf{E}_\perp^{(+)}(\mathbf{R}_2, t_2) \mathbf{E}_\perp^{(+)}(\mathbf{R}_1, t_1) |\{\alpha_i\}\rangle \\ &= s^2 \mathcal{E}^{(-)}(\{\alpha_i\}, \mathbf{R}_1, t_1) \mathcal{E}^{(-)}(\{\alpha_i\}, \mathbf{R}_2, t_2) \mathcal{E}^{(+)}(\{\alpha_i\}, \mathbf{R}_2, t_2) \mathcal{E}^{(+)}(\{\alpha_i\}, \mathbf{R}_1, t_1) \end{aligned} \quad (33)$$

Le résultat quantique pour W_{II} coïncide donc bien avec la prédiction semi-classique. La même conclusion demeure valable si l'état du champ quantique est un mélange statistique d'états cohérents $|\{\alpha_i\}\rangle$ avec des poids $P(\{\alpha_i\})$.

Une autre situation où les prédictions quantique et semi-classique coïncident est celle d'un champ thermique. Dans la description quantique, le théorème de Wick (Complément C_{XVI}) permet alors d'exprimer la fonction de corrélation à quatre points qui apparaît dans W_{II} sous forme de sommes de produits de fonctions de corrélation à deux points. De même, en théorie semi-classique, le champ thermique est un champ aléatoire gaussien et, là aussi, la fonction de corrélation classique à quatre points est une somme de produits de fonctions de corrélation à deux points. À condition de prendre les mêmes fonctions de corrélation à deux points dans les deux théories, leurs prédictions coïncident.

Remarque

L'analyse interférométrique du champ électrique de la lumière émise par les étoiles (pour mesurer leur diamètre angulaire) se heurte à la difficulté des fluctuations de l'atmosphère qui introduisent un déphasage aléatoire entre les deux bras de l'interféromètre. L'analyse de corrélations d'intensité est beaucoup moins sensible à ces fluctuations. Comme les ondes émises par les différentes parties de l'étoile sont incohérentes, le champ total reçu est gaussien, et le résultat établi plus haut montre que l'analyse des corrélations d'intensité permet d'obtenir la fonction de corrélation à deux points et donc le même renseignement que celui que fournirait une mesure des corrélations du champ. La validité d'une telle méthode basée sur les corrélations d'intensité a été démontrée en 1956 par Robert Hanbury Brown et Richard Twiss [44].

β. Situations nécessitant une théorie quantique du rayonnement

Un exemple d'une situation où un traitement quantique du rayonnement devient indispensable est représenté sur la figure (2). Un paquet d'ondes à un photon est émis par un atome A ; ce paquet d'ondes est décrit par ϕ (cf. Complément E_{XX}). Il traverse ensuite une lame séparatrice LS qui le divise en deux paquets d'ondes : un paquet d'ondes transmis ϕ_T et un paquet d'ondes réfléchi ϕ_R , qui arrivent ensuite sur deux détecteurs D_1 et D_2 .

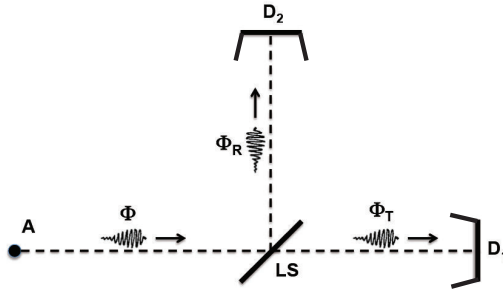


FIGURE 2 – Un atome A émet un photon décrit par un paquet d'ondes ϕ . Ce paquet d'ondes traverse une lame séparatrice et donne naissance à un paquet d'ondes transmis ϕ_T et un paquet d'ondes réfléchi ϕ_R qui arrivent sur deux détecteurs D_1 et D_2 . Les prédictions quantique et semi-classique concernant les corrélations entre les signaux détectés sur D_1 et D_2 sont nettement différentes (voir texte).

Dans une description quantique du rayonnement, l'état ψ du rayonnement après traversée de la lame séparatrice est toujours un état à un seul photon, décrit par une superposition linéaire des deux paquets d'ondes à un photon ϕ_T et ϕ_R , où :

$$|\psi\rangle = c_T|\phi_T\rangle + c_R|\phi_R\rangle \tag{34}$$

Dans l'expression (27) du taux W_{II} donnant la probabilité pour que le détecteur D_1 en \mathbf{R}_1 soit photo-ionisé à l'instant t_1 et que le détecteur D_2 en \mathbf{R}_2 soit photo-ionisé

à l'instant t_2 , figure le carré de la norme du ket :

$$\mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}_2, t_2)\mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}_1, t_1)|\psi\rangle \quad (35)$$

où ψ est donné par (34). Le premier opérateur $\mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}_1, t_1)$, qui détruit un photon, donne le vide $|0\rangle$ quand il agit sur l'état $|\psi\rangle$ qui ne contient qu'un photon. Le second opérateur de destruction $\mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}_2, t_2)$ donne alors 0 quand il agit sur le vide. Les deux détecteurs D_1 et D_2 ne peuvent donc donner lieu à une photo-ionisation tous les deux. Ce résultat était évident a priori : un seul photon ne peut pas produire deux photo-ionisations.

Si en revanche le rayonnement émis par l'atome est décrit classiquement, les deux paquets d'ondes ϕ_1 et ϕ_2 sont des paquets d'ondes classiques qui peuvent chacun photo-ioniser les détecteurs D_1 et D_2 quand ils arrivent sur eux.

Des sources de photons uniques ne sont pas faciles à réaliser. Une expérience se rapprochant de la situation de la Figure 2 est décrite dans la référence [45]. Elle utilise, comme source de lumière remplaçant l'atome A de la figure 2, des atomes émettant des paires de photons dans une cascade radiative : l'atome émet un photon de fréquence ν_{α} en passant d'un état α à un état β , puis un photon ν_{β} en passant de l'état β à un état γ . Soit τ_{β} la durée de vie radiative de l'état β . Le photon ν_{β} est émis après le photon ν_{α} dans une fenêtre temporelle dont la largeur est de l'ordre de τ_{β} . Supposons qu'on ajoute au montage expérimental de la Figure 2 un troisième détecteur (non représenté sur la figure) dont le rôle est de détecter le photon ν_{α} et de fixer ainsi un temps de départ : à partir de chaque détection d'un photon ν_{α} , les détecteurs D_1 et D_2 ne sont actifs que pendant un intervalle de temps durant τ_{β} . La probabilité de détecter un seul photon ν_{β} dans cette fenêtre temporelle est beaucoup plus élevée que dans une fenêtre temporelle quelconque (de même durée, mais non déclenchée par la détection du photon ν_{α}). Avec cette méthode de corrélation, on a ainsi l'équivalent d'une source à un photon, et on observe que le photon ν_{β} ne peut exciter simultanément les deux détecteurs D_1 et D_2 .

γ . *Fluorescence de résonance d'un atome unique. Dégrouperement de photons*

Une autre expérience mettant clairement en évidence la nécessité d'une description quantique du rayonnement consiste à étudier la fonction de corrélation W_{II} d'ordre 2 de la lumière de fluorescence émise par un atome ou un ion unique excité par un faisceau laser résonnant.

Supposons que l'objet émetteur A de la Figure 2 soit un ion unique piégé⁵. Sous l'effet de l'excitation laser résonnante, l'ion émet une succession de photons qui sont envoyés dans le dispositif de la Figure 2. Les distances entre la séparatrice LS et les détecteurs D_1 et D_2 sont égales, de sorte que les deux paquets d'ondes associés à chaque photon arrivent en même temps sur D_1 et D_2 .

Pour une excitation laser continue et d'intensité constante, les propriétés statistiques de la lumière de fluorescence sont invariantes par translation dans le temps,

5. Le piégeage des ions est maintenant une technique bien maîtrisée. Les résultats présentés sur la Figure 3 ont été obtenus sur un ion unique $^{24}\text{Mg}^+$ [46]. Les premières expériences mettant en évidence un dégroupement de photons sur la lumière de fluorescence d'un atome unique ont été effectuées sur un jet atomique de sodium d'intensité très faible, avec un volume d'observation suffisamment faible pour que la probabilité d'avoir plus d'un atome dans ce volume soit très petite [47].

de sorte que la fonction de corrélation quantique $W_{II}(\mathbf{R}_2, t_2; \mathbf{R}_1, t_1)$ caractérisant les photo-ionisations enregistrées sur D_1 et D_2 ne dépend que de $\tau = t_1 - t_2$. Nous la noterons $g^{(2)}(\tau)$. La Figure 3 montre les variations de $g^{(2)}(\tau)$ avec τ pour des valeurs croissantes (de bas en haut) de l'intensité laser. On voit sur cette figure que $g^{(2)}(\tau)$ s'annule quand $\tau = 0$; en d'autres termes, les photons détectés sont "dégroupés" temporellement (on ne peut pas détecter simultanément un photon en D_1 et en D_2).

L'interprétation quantique de ce résultat est la suivante. Quand l'ion émet un photon, ce dernier est détecté, soit en D_1 , soit en D_2 . Immédiatement après l'émission d'un photon, l'ion est "projeté" dans l'état fondamental g de la transition $e - g$ excitée par le laser. Il ne peut donc émettre immédiatement un second photon. Il faut qu'il soit ré-excité par le laser et cela demande un certain temps. C'est ce qui explique pourquoi $g^{(2)}(\tau)$ s'annule quand $\tau = 0$. En fait, après l'émission d'un photon, l'ion, partant de g , oscille entre l'état g et l'état excité e à la fréquence de Rabi caractérisant le couplage atome-laser, proportionnelle à l'amplitude du champ laser. Ces oscillations de Rabi expliquent les oscillations de $g^{(2)}(\tau)$ avec τ apparaissant sur la figure 3 avec une fréquence de plus en plus élevée quand l'intensité laser croît.

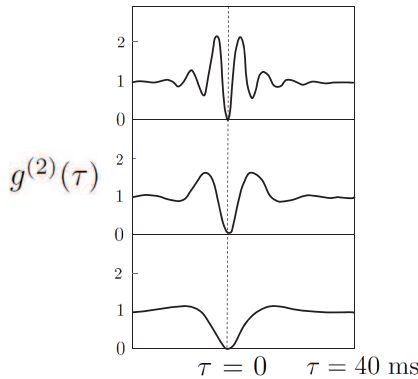


FIGURE 3 – Corrélations temporelles $g^{(2)}(\tau)$ entre les signaux fournis par les deux détecteurs D_1 et D_2 en fonction du délai τ entre les deux détections. Les trois courbes correspondent à des intensités croissantes (de bas en haut) du faisceau laser qui excite la fluorescence de résonance de l'ion piégé. On constate que $g^{(2)}(\tau)$ s'annule en $\tau = 0$; pour les petites valeurs positives de τ , elle est une fonction croissante de cette variable (figure adaptée à partir de [46]).

Examinons maintenant les prédictions d'une théorie traitant classiquement le champ émis par l'ion. Nous avons vu plus haut que les corrélations entre les taux de photo-ionisation des deux détecteurs sont décrites par la fonction de corrélation $\overline{\mathcal{I}(t)\mathcal{I}(t + \tau)}$ de l'intensité classique $\mathcal{I}(t)$. Pour un champ stationnaire, cette fonction

de corrélation classique $g_{\text{cl}}^{(2)}$ ne dépend que de τ :

$$\overline{\mathcal{I}(t)\mathcal{I}(t+\tau)} = g_{\text{cl}}^{(2)}(\tau) \quad (36)$$

D'autre part, en écrivant que $\overline{(\mathcal{I}(t) - \mathcal{I}(t+\tau))^2} \geq 0$, on obtient :

$$\overline{(\mathcal{I}(t))^2} + \overline{(\mathcal{I}(t+\tau))^2} \geq 2 \overline{\mathcal{I}(t)\mathcal{I}(t+\tau)}$$

c'est-à-dire encore, compte tenu de la stationnarité du champ et de (36) :

$$g_{\text{cl}}^{(2)}(\tau = 0) \geq g_{\text{cl}}^{(2)}(\tau) \quad (37)$$

La théorie semi-classique prédit donc que $g_{\text{cl}}^{(2)}(\tau)$ est une fonction non croissante de τ au voisinage de $\tau = 0$. Ceci est en contradiction avec les résultats expérimentaux représentés sur la figure 3, et montre donc que la lumière de fluorescence émise par un ion excité par un faisceau laser résonnant ne peut pas être décrite comme un champ classique.

La théorie quantique du rayonnement est donc indispensable pour rendre compte de la totalité des expériences de photo-ionisation. Ceci reste vrai même si l'effet photo-électrique simple observé sur un seul photo-détecteur peut être décrit avec une théorie semi-classique (sans photons).

4. Photo-ionisation à deux photons

4-a. Différences avec la photo-ionisation à un photon

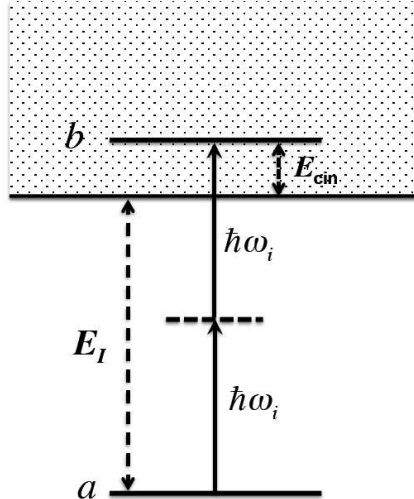


FIGURE 4 – Photo-ionisation à deux photons. L'atome passe de l'état a à un état b appartenant au continuum d'ionisation en absorbant deux photons d'énergie $\hbar\omega_i$. L'électron produit à l'issue de ce processus quitte l'atome avec une énergie cinétique qui, lorsque l'électron est loin de l'ion, est égale à $E_{\text{cin}} = 2\hbar\omega_i - E_I$.

Nous considérons maintenant un processus d'absorption à deux photons analogue à ceux étudiés dans le Complément A_{XX}, mais où l'état final b du processus d'absorption à deux photons appartient au continuum d'ionisation de l'atome débutant à une distance E_I (énergie d'ionisation) au-dessus de l'état fondamental a (Fig. 4). On parle alors de photo-ionisation à deux photons.

Le processus de photo-ionisation transforme l'atome en un ion et un électron qui s'en éloigne. Lorsque la distance entre l'électron et l'ion est suffisamment grande, leur énergie d'interaction coulombienne est négligeable, et l'énergie de l'électron se réduit à son énergie cinétique qui, par suite de la conservation de l'énergie totale, est égale à :

$$E_{\text{cin}} = 2\hbar\omega_i - E_I \tag{38}$$

Si l'on trace les variations de E_{cin} en fonction de ω_i , on obtient une demi-droite de pente $2\hbar$ qui part sur l'axe des abscisses du point d'abscisse $E_I/2\hbar$. Ce résultat constitue une généralisation de la loi de l'effet photo-électrique établie en 1905 par Einstein.

Le résultat précédent montre clairement qu'il n'est pas nécessaire que l'énergie $\hbar\omega_i$ des photons incidents soit supérieure à l'énergie d'ionisation pour que l'atome soit photo-ionisé. Sur la figure 4, on voit que $\hbar\omega_i$ est inférieur à E_I alors que $2\hbar\omega_i$ est supérieur à E_I . Ce résultat peut se généraliser : si $p\hbar\omega_i < E_I$, avec $p = 1, 2, \dots, q-1$, mais si $q\hbar\omega_i > E_I$, on parle de photo-ionisation à q photons. L'énergie cinétique E_{cin} du photoélectron, une fois qu'il s'est suffisamment éloigné de l'ion, est égale à la différence $E_{\text{cin}} = q\hbar\omega_i - E_I$.

4-b. Taux de photo-ionisation

Commençons par supposer le rayonnement monochromatique. Nous pouvons alors utiliser les expressions (13) et (14) du Complément A_{XX} de l'amplitude de probabilité d'absorption à deux photons, dont le module au carré fournit une probabilité. L'état final b appartenant à un continuum, il faut sommer cette probabilité sur b ; on peut pour cela utiliser la règle d'or de Fermi, ce qui conduit à une probabilité de photo-ionisation par unité de temps. Comme le module au carré de (14) est proportionnel à $n_i(n_i - 1)$, où n_i est le nombre de photons incidents, le taux de photo-ionisation croît donc comme le carré de l'intensité incidente si $n_i \gg 1$. On montrerait de même, dans le cas d'une photo-ionisation à q photons, que le taux de photo-ionisation croît comme la puissance q de l'intensité incidente (si $n_i \gg 1$).

Considérons maintenant le cas d'un rayonnement non monochromatique stationnaire. Comme dans le § 2-b, nous supposons que la densité spectrale du rayonnement est centrée autour d'une fréquence $\bar{\omega}$ et a une largeur $\Delta\omega_R$ beaucoup plus petite que la largeur spectrale $\Delta\omega_A$ du détecteur. La fonction de corrélation $G_R^N(t' - t'')$ du champ qui intervient dans la probabilité d'absorption à deux photons est toujours donnée par la relation (26) du Complément A_{XX}. Les deux opérateurs $\bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t')$ qui figurent dans cette équation ont une dépendance temporelle dominée par l'exponentielle $e^{-i\bar{\omega}t'}$. De même, les deux opérateurs $\bar{\mathbf{E}}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t'')$ ont une dépendance temporelle dominée par l'exponentielle $e^{+i\bar{\omega}t''}$. Le même raisonnement que celui fait dans le § 2-b- β ci-dessus et conduisant à l'équation (14) permet d'écrire :

$$G_R^N(t' - t'') = e^{-i2\bar{\omega}(t' - t'')} C_R^N(t' - t'') \tag{39}$$

où $C_R^N(t' - t'')$ est une fonction “enveloppe” dont la dépendance en $t' - t''$ est beaucoup plus lente, avec des échelles de temps de l'ordre de $1/\Delta\omega_R$. Dans la double intégrale de (8), la fonction de corrélation $G_A(t' - t'')$ n'est différente de zéro que pour $|t' - t''| < \tau_{CA}$ où τ_{CA} est le temps de corrélation du dipôle atomique, beaucoup plus court que $1/\Delta\omega_R$. On peut donc, comme dans le § 2-b- β , prendre $t' = t''$ dans la fonction enveloppe de la relation (39) qui donne G_R^N . On en déduit que la fonction de corrélation du champ intervenant dans le taux de photo-ionisation à deux photons peut être prise égale à :

$$G_R^N(t' - t'') = e^{-i2\bar{\omega}(t' - t'')} \times \\ \langle \phi_{\text{in}}^R | \left[\mathbf{e}_{ca}^* \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t') \right] \left[\mathbf{e}_{bc}^* \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t') \right] \\ \left[\mathbf{e}_{bc} \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') \right] \left[\mathbf{e}_{ca} \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') \right] | \phi_{\text{in}}^R \rangle \quad (40)$$

La valeur moyenne apparaissant dans cette équation est d'ailleurs indépendante de t' puisque le rayonnement est supposé stationnaire.

4-c. Importance des fluctuations des valeurs de l'intensité du rayonnement

Même si le rayonnement est monochromatique, c'est-à-dire si un seul mode i est peuplé, son intensité peut avoir plusieurs valeurs possibles réparties autour d'une valeur moyenne ; le seul cas où cette intensité est bien définie est celui d'un état de Fock $|n_i\rangle$. Si nous nous limitons à un rayonnement monochromatique stationnaire, l'état le plus général est un mélange statistique d'états de Fock $|n_i\rangle$ avec des poids $p(n_i)$.

Par exemple, si le mode i est en équilibre thermodynamique à la température T , la probabilité qu'il contienne n_i photons est :

$$p(n_i) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{(n_i+1/2)\hbar\omega_i}{k_B T}} \quad (41)$$

où k_B est la constante de Boltzmann et Z la fonction de partition donnée par :

$$Z = \sum_{n_i} e^{-\frac{(n_i+1/2)\hbar\omega_i}{k_B T}} \quad (42)$$

À partir de ces deux équations, on peut aisément calculer la valeur moyenne \bar{n} de n et la valeur moyenne $\overline{n^2}$ de n^2 pour un rayonnement en équilibre thermodynamique (voir ci-dessous). On trouve en particulier que

$$\overline{n^2} = \bar{n} + 2(\bar{n})^2 \quad (43)$$

D'après ce qui précède, le taux de photo-ionisation à deux photons est proportionnel à $n(n-1) = \overline{n^2} - \bar{n}$. Si le rayonnement n'a aucune dispersion en intensité, c'est-à-dire s'il est dans un état de Fock $|n\rangle$, on a $\overline{n^2} = (\bar{n})^2$ et le taux de photo-ionisation est proportionnel à $(\bar{n})^2$ si $\bar{n} \gg 1$. En revanche, s'il est dans un état d'équilibre thermodynamique avec la même valeur moyenne de n , le taux de photo-ionisation est, d'après (43), proportionnel à $2(\bar{n})^2$, c'est-à-dire deux fois plus grand que pour un état sans dispersion en intensité et de même valeur moyenne de n . Une fluctuation d'intensité, pour une même valeur moyenne de n , augmente donc considérablement

le taux de photo-ionisation. Un tel résultat n'est pas surprenant pour un effet non linéaire : les valeurs de n au-dessus de la valeur moyenne contribuent plus que les valeurs au-dessous.

Démonstration de la relation (43)

Ce calcul a déjà été exposé aux §§ 2-b et 3-b du Complément B_{XV}; rappelons-en cependant très brièvement le principe. On peut poser $x = \hbar\omega_i/k_B T$ et éliminer le facteur sans importance $e^{-x/2}$ de la fonction de partition en posant :

$$Z(x) = e^{-x/2} K(x) \tag{44}$$

La fonction $K(x)$ se calcule facilement, puisque :

$$K(x) = 1 + e^{-x} + e^{-2x} + \dots + e^{-nx} + \dots = \frac{1}{1 - e^{-x}} \tag{45}$$

D'autre part :

$$\begin{aligned} \bar{n} &= \sum_i n_i p(n_i) = \frac{1}{K(x)} \sum_i n_i e^{-n_i x} \\ &= \frac{-1}{K(x)} \frac{dK(x)}{dx} \end{aligned} \tag{46}$$

On en déduit :

$$\bar{n} = \frac{1}{1 - e^{-x}} \tag{47}$$

Un calcul semblable permet d'obtenir $\overline{n^2}$ à partir de la dérivée seconde $d^2 K(x)/dx^2$ et d'obtenir la relation (43), qui est équivalente à la relation (42) du Complément B_{XV}.

Si le rayonnement n'est plus monochromatique mais stationnaire et à l'équilibre thermodynamique, on peut partir de la fonction de corrélation (40) du champ et utiliser le théorème de Wick (Complément C_{XVI}) pour ré-écrire cette fonction comme une somme de produits de fonctions de corrélation d'ordre 2 :

$$\begin{aligned} G_R^N(t' - t'') &= e^{-i2\bar{\omega}(t' - t'')} \times \\ &\left\{ \langle \phi_{\text{in}}^R | \left[\mathbf{e}_{ca}^* \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t') \right] \left[\mathbf{e}_{ca} \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') \right] | \phi_{\text{in}}^R \rangle \right. \\ &\quad \times \langle \phi_{\text{in}}^R | \left[\mathbf{e}_{bc}^* \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t') \right] \left[\mathbf{e}_{bc} \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') \right] | \phi_{\text{in}}^R \rangle \\ &\quad + \langle \phi_{\text{in}}^R | \left[\mathbf{e}_{ca}^* \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t') \right] \left[\mathbf{e}_{bc} \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') \right] | \phi_{\text{in}}^R \rangle \\ &\quad \left. \times \langle \phi_{\text{in}}^R | \left[\mathbf{e}_{bc}^* \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(-)}(\mathbf{R}, t') \right] \left[\mathbf{e}_{ca} \cdot \mathbf{E}_{\perp}^{(+)}(\mathbf{R}, t') \right] | \phi_{\text{in}}^R \rangle \right\} \end{aligned} \tag{48}$$

5. Ionisation tunnel avec des champs laser intenses

Avec l'apparition des sources laser de forte puissance, l'étude des processus de photo-ionisation à plusieurs photons a permis la découverte de nombreux effets

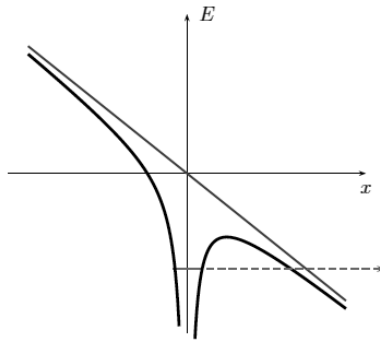


FIGURE 5 – *Potentiel effectif vu par un électron lors d'une ionisation tunnel. L'électron quitte l'ion en passant par effet tunnel à travers la barrière de potentiel formée par la somme du potentiel coulombien de l'ion et du potentiel linéaire $-qEx$ associé au champ électrique du laser, ici supposé polarisé linéairement le long de l'axe x .*

physiques nouveaux. En particulier, quand le champ laser instantané devient de l'ordre du champ de Coulomb liant l'électron au noyau, l'ionisation ne résulte plus d'un processus d'ionisation à plusieurs photons, mais d'un effet tunnel. Le champ laser, qui donne naissance à un potentiel dépendant linéairement de la distance électron-noyau, abaisse la barrière de Coulomb suffisamment pour que l'électron puisse s'échapper par effet tunnel (voir Fig. 5). Une fois que l'électron a quitté l'ion, il est accéléré par le champ laser. Quand le champ laser oscillant change de signe, l'accélération produite par le champ laser s'inverse, l'électron revient vers l'ion et émet lors du passage au voisinage de l'ion un rayonnement de freinage. On peut montrer que la fréquence de rayonnement est une fréquence harmonique impaire de la fréquence laser, d'ordre très élevé, pouvant atteindre plusieurs centaines. Comme la fraction de période du champ laser pendant laquelle l'électron peut s'échapper par effet tunnel est très petite, le paquet d'ondes de l'électron qui a quitté l'ion a une extension temporelle très courte. Le rayonnement de freinage auquel il donne naissance lors de son retour sur l'ion a donc également une durée très brève qui s'exprime en dizaines d'attosecondes (une attoseconde est égale à 10^{-18} sec). Le lecteur intéressé par ces développements pourra trouver une revue récente dans les Chapitres 10 et 27 de la référence [23].

Complément C_{XX}

Atome à deux niveaux dans un champ monochromatique. Méthode de l'atome habillé

1	Brève description de la méthode de l'atome habillé . .	563
1-a	Energies des états du système atome + photons en l'absence de couplage	563
1-b	Éléments de matrice du couplage	564
1-c	Principe de la méthode de l'atome habillé	565
1-d	Sens physique du nombre de photons	567
1-e	Effets de l'émission spontanée	568
2	Domaine des couplages faibles	569
2-a	Valeurs propres et vecteurs propres de l'hamiltonien effectif	569
2-b	Déplacements lumineux et élargissement radiatif	570
2-c	Variations avec l'intensité incidente et le désaccord . . .	571
2-d	Interprétation semi-classique dans le domaine des couplages faibles	572
2-e	Quelques généralisations	572
3	Domaine des couplages forts	574
3-a	Valeurs propres et vecteurs propres de l'hamiltonien effectif	574
3-b	Variation des énergies des états habillés avec le désaccord	575
3-c	Triplet de fluorescence	577
3-d	Corrélations temporelles entre les photons de fluorescence	578
4	Modifications du champ. Dispersion et absorption . .	580
4-a	Atome dans une cavité	580
4-b	Déplacement de la fréquence du champ en présence de l'atome	581
4-c	Absorption du champ	582

Introduction

Nous avons calculé dans le § B du Chapitre XX l'amplitude de probabilité pour qu'un atome placé dans un rayonnement monochromatique passe d'un état discret a à un autre état discret b en absorbant un photon. Nous nous sommes cependant limités à un traitement perturbatif, en nous restreignant à l'ordre le plus bas vis-à-vis de l'hamiltonien d'interaction. A priori, les prédictions d'un tel calcul approché ne sont donc correctes que pour des temps suffisamment courts pour que les corrections d'ordres plus élevés restent négligeables. Dans ce complément, nous exposons une autre approche des interactions atomes-photons, appelée "méthode de l'atome habillé", qui n'a pas ces limitations. Elle consiste à considérer comme un système quantique unique l'atome ainsi que le mode du champ quantique avec lequel

il interagit. Comme ce système unique est décrit par un hamiltonien indépendant du temps¹, on peut étudier son diagramme d'énergie et en tirer de nombreuses informations utiles.

On peut ainsi améliorer les résultats du Chapitre XX. La méthode de l'atome habillé fournit en effet une description non perturbative des processus physiques étudiés, de sorte qu'elle reste valable même si le champ est intense. Elle apporte un éclairage nouveau sur plusieurs phénomènes physiques importants : comportement des atomes dans un champ électromagnétique intense, répartition spectrale de la lumière ré-émise spontanément par l'atome dans ces conditions ; corrélations temporelles entre les photons émis ; origine des forces exercées sur l'atome par un rayonnement dont l'intensité varie dans l'espace.

Pour mieux nous conformer aux notations courantes du domaine, et comme nous l'avons déjà fait dans le Complément C_{XIX}, nous noterons ici g l'état atomique fondamental (en anglais "*ground state*") et e l'état atomique excité (au lieu de a et b). Pour la même raison, plutôt que de garder la notation ω_i du Chapitre XX pour la fréquence angulaire du faisceau exciteur, nous la noterons ω_L , ce qui évoque plus directement un faisceau laser dont l'intensité peut être élevée.

Nous commençons dans le § 1 par un exposé succinct de la méthode de l'atome habillé². Nous supposons que la fréquence ω_L est proche de la résonance avec celle de la fréquence atomique $\omega_0 = (E_e - E_g)/\hbar$, mais suffisamment éloignée des fréquences de toutes les autres transitions atomiques. L'interaction entre atome et rayonnement sera caractérisée par une fréquence appelée "fréquence de Rabi" ; elle est l'analogue, dans ce traitement quantique du rayonnement, de la fréquence de précession d'un spin tournant dans une expérience de résonance magnétique autour d'un champ de radiofréquence traité classiquement (Complément F_{IV}). La connaissance du diagramme d'énergies nous permettra d'étudier aussi bien le régime des couplages faibles (fréquence de Rabi faible devant la largeur naturelle Γ de l'état e ou le désaccord $|\omega_L - \omega_0|$ entre la fréquence du champ et la fréquence atomique) que celui des couplages forts (fréquence de Rabi grande devant la largeur naturelle et le désaccord).

Le § 2 est consacré au régime des couplages faibles. Nous montrons que l'état fondamental subit un déplacement lumineux (ou "*light shift*"), proportionnel à l'intensité du champ, et variant avec le désaccord comme une courbe de dispersion de Lorentz. L'état fondamental subit également un élargissement radiatif, proportionnel à l'intensité du champ, qui peut s'interpréter comme une probabilité par unité de temps de quitter l'état fondamental par absorption d'un photon.

Le § 3 aborde le domaine des couplages forts, où apparaît l'oscillation de Rabi entre les états g et e , qui est cependant amortie à cause de l'instabilité radiative de e . Le diagramme d'énergie de l'atome habillé permet d'interpréter des phénomènes spécifiques des couplages forts, comme le triplet de fluorescence et les corrélations temporelles entre les photons émis dans les composantes latérales de ce triplet.

Le couplage atome-champ perturbe non seulement l'atome mais également le champ. Nous montrons dans le § 4 que les parties réelle et imaginaire de l'indice de réfraction associé à la présence de l'atome sont, pour le champ, des perturbations de

1. Ceci ne serait évidemment pas possible dans le cadre d'une description classique du rayonnement (même lorsque l'atome est traité quantiquement), puisque le champ varie alors sinusoidalement en fonction du temps, de sorte que l'hamiltonien de couplage avec l'atome dépend du temps.

2. Une description plus détaillée peut être trouvée dans le Chapitre VI de [20].

même nature que les déplacements lumineux et l'élargissement radiatif pour l'atome.

1. Brève description de la méthode de l'atome habillé

Nous appelons "mode laser L " le mode du champ quantique qui est peuplé de photons de fréquence ω_L . En l'absence de couplage entre l'atome A et ce mode laser, l'hamiltonien du système total $A + L$ est égal à $H_A + H_L$, où H_A est l'hamiltonien de l'atome et H_L celui du rayonnement dans le mode laser L . Les niveaux d'énergie de $H_A + H_L$ sont indexés par deux nombres quantiques : e ou g pour l'état interne de l'atome³, N pour le nombre de photons dans l'unique mode du rayonnement qui n'est pas vide, mais contient des photons de fréquence ω_L .

1-a. Energies des états du système atome + photons en l'absence de couplage

Considérons les deux états $|g, N\rangle$ et $|e, N - 1\rangle$, dont les énergies par rapport au vide de photons sont :

$$E_{g,N} = E_g + N\hbar\omega_L \quad E_{e,N-1} = E_e + (N - 1)\hbar\omega_L \quad (1)$$

Ils sont séparés par un intervalle d'énergie :

$$\begin{aligned} E_{g,N} - E_{e,N-1} &= \hbar\omega_L - (E_e - E_g) \\ &= \hbar(\omega_L - \omega_0) = \hbar\delta \end{aligned} \quad (2)$$

où :

$$\delta = \omega_L - \omega_0 \quad (3)$$

est le désaccord en fréquence entre la fréquence ω_L du champ et la fréquence $\omega_0 = (E_e - E_g)/\hbar$ de la transition atomique. Quand le champ est résonnant, c'est-à-dire quand $\omega_L = \omega_0$, les deux états sont dégénérés. Nous considérerons ici des désaccords très faibles (en module) devant ω_0 :

$$|\delta| \ll \omega_0 \quad (4)$$

Alors, même si le champ n'est pas exactement résonnant, les deux états $|g, N\rangle$ et $|e, N - 1\rangle$ engendrent une multiplicité $\mathcal{E}(N)$ de dimension deux :

$$\mathcal{E}(N) = \{|g, N\rangle, |e, N - 1\rangle\} \quad (5)$$

qui est très éloignée de tous les autres états du système atome + champ. Une infinité d'autres multiplicités existe, pour des valeurs de N allant de 0 à l'infini. La Figure 1 représente à titre d'exemple les trois multiplicités $\mathcal{E}(N - 1)$, $\mathcal{E}(N)$ et $\mathcal{E}(N + 1)$; il en existe $N - 1$ autres dont l'énergie est plus faible, et une infinité d'énergies supérieures. Elles sont séparées les unes des autres par une distance $\hbar\omega_L$, la distance entre les deux niveaux à l'intérieur de chaque multiplicité étant égale à $\hbar\delta$. La multiplicité $\mathcal{E}(1)$, qui correspond à $N = 1$, est formée des deux états $|g, 1\rangle$ et $|e, 0\rangle$; en revanche, l'état $|g, 0\rangle$ est isolé.

³. Nous traitons ici classiquement les degrés de liberté externes en supposant l'atome fixe en un point \mathbf{R} .

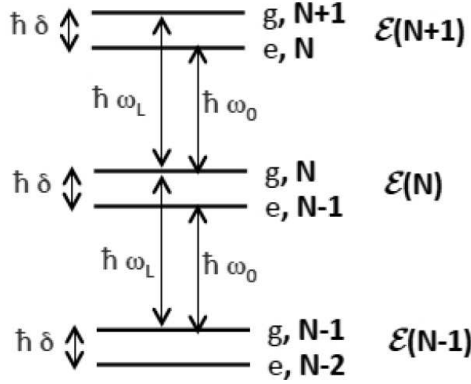


FIGURE 1 – Niveaux d'énergie du système atome + photons en l'absence de couplage. Seules trois multiplicités adjacentes, $\mathcal{E}(N-1)$, $\mathcal{E}(N)$ et $\mathcal{E}(N+1)$ sont représentées sur la figure ; il en existe cependant de nombreuses autres en dessous ou au-dessus, qui correspondent à des valeurs de N plus faibles ou plus grandes. Les flèches verticales relient des paires de niveaux dont l'écart d'énergie est indiquée à côté de la flèche.

1-b. Éléments de matrice du couplage

Le couplage H_I entre l'atome et le mode ω_L est proportionnel au produit du moment dipolaire \mathbf{D} de l'atome et de la composante dans le mode ω_L du champ électrique \mathbf{E} du rayonnement. Avec un choix convenable de l'origine des coordonnées, on peut avoir $e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{R}} = -i$ où \mathbf{R} est la position du centre de masse de l'atome, de sorte que H_I s'écrit :

$$H_I = -\sqrt{\frac{\hbar \omega_L}{2\varepsilon_0 L^3}} \mathbf{D} \cdot (\varepsilon_L a_L + \varepsilon_L^* a_L^\dagger) \quad (6)$$

Les seuls éléments de matrice non nuls de l'opérateur impair \mathbf{D} sont ceux entre e et g . Les opérateurs de destruction et de création a_L et a_L^\dagger font varier N de ∓ 1 . On en déduit que $|g, N\rangle$ est couplé à $|e, N-1\rangle$ et $|e, N+1\rangle$, alors que $|e, N-1\rangle$ est couplé à $|g, N\rangle$ et $|g, N-2\rangle$. Les deux états $|g, N\rangle$ et $|e, N-1\rangle$ de la multiplicité $\mathcal{E}(N)$ sont donc couplés entre eux avec un élément de matrice :

$$\langle e, N-1 | H_I | g, N \rangle = \frac{\hbar \Omega_N}{2}, \quad (7)$$

où Ω_N est la "fréquence de Rabi" définie par :

$$\Omega_N = \sqrt{N} \Omega_1 \quad (8)$$

avec :

$$\Omega_1 = -\frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar \omega_L}{2\varepsilon_0 L^3}} \varepsilon_L \cdot \langle e | \mathbf{D} | g \rangle \quad (9)$$

Nous supposons que Ω_1 est réel et positif ; si ce n'est pas le cas, il suffit de changer

la phase relative⁴ des kets $|g\rangle$ et $|e\rangle$ pour modifier à volonté la phase de l'élément de matrice $\langle e|\mathbf{D}|g\rangle$, ce qui permet d'obtenir cette condition par un choix adéquat.

Comme l'opérateur H_I change à la fois le nombre de photons d'une unité et l'état interne de l'atome, il n'a pas d'éléments de matrice entre les kets de la multiplicité $\mathcal{E}(N)$ et ceux des multiplicités $\mathcal{E}(N \pm 1)$. En revanche, il peut coupler au second ordre ces kets à ceux des multiplicités $\mathcal{E}(N \pm 2)$ et, à des ordres plus élevés, à ceux d'autres multiplicités encore plus éloignées. Cependant les niveaux de ces multiplicités sont à des distances énergétiques de l'ordre de $2\hbar\omega_L$ (ou d'un multiple de cette énergie), alors que nous supposons que les éléments de matrice de l'interaction sont très petits devant $\hbar\omega_L$. On effectue ainsi un calcul à l'ordre le plus bas en $|\delta|/\omega_L$, mais nous verrons par la suite que la méthode reste non perturbative vis-à-vis d'autres paramètres qui jouent un rôle essentiel (*cf.* Remarque à la fin du § 1-e). Les énergies des multiplicités autres que $\mathcal{E}(N)$ sont alors trop différentes de celles de $\mathcal{E}(N)$ pour que ces autres multiplicités jouent un rôle significatif. Nous ne tiendrons donc pas compte de ces couplages non résonnants, dont l'effet est négligeable pour une excitation quasi résonnante.

1-c. Principe de la méthode de l'atome habillé

Au début du § 1, nous avons considéré les états quantiques du système $A + L$ (atome plus mode laser) en l'absence de couplage; nous avons montré qu'ils se regroupent en multiplicités $\mathcal{E}(N)$, avec $N = 0, 1, 2, \dots$, bien séparées les unes des autres lorsque la condition (4) est vérifiée. Par exemple, la Figure 1 montre que la multiplicité $\mathcal{E}(N)$ pour un atome à deux niveaux g et e comprend les états $|g, N\rangle$ et $|e, N - 1\rangle$ séparés par une énergie $\hbar\delta$. La relation (7) montre que ces deux états sont couplés par l'opérateur d'interaction H_I entre A et L , et que les éléments de matrice sont égaux à $\hbar\Omega_N/2$. Nous avons également vu pourquoi, avec une excitation quasi résonnante, les couplages entre multiplicités différentes sont négligeables, de sorte que nous pouvons étudier séparément chaque multiplicité $\mathcal{E}(N)$.

α. Etats et énergies habillées

La première étape de la démarche de l'atome habillé consiste donc à étudier les niveaux d'énergie du système $A + L$ à l'intérieur de $\mathcal{E}(N)$, compte tenu du terme de couplage interne à $\mathcal{E}(N)$. Il faut donc diagonaliser l'hamiltonien $H_A + H_L + H_I$ à l'intérieur de ce sous-espace. Pour un atome à deux niveaux, la restriction de cet hamiltonien dans $\mathcal{E}(N)$, que nous noterons $H_{AL}^{(N)}$, est représentée par une matrice hermitique 2×2 égale à :

$$\begin{aligned} \left(H_{AL}^{(N)}\right) &= \begin{pmatrix} E_g + N\hbar\omega_L & \hbar\Omega_N/2 \\ \hbar\Omega_N/2 & E_e + (N-1)\hbar\omega_L \end{pmatrix} \\ &= [E_e + (N-1)\hbar\omega_L] \mathbb{1} + \hbar \begin{pmatrix} \delta & \Omega_N/2 \\ \Omega_N/2 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10)$$

où $\mathbb{1}$ est l'opérateur unité dans $\mathcal{E}(N)$.

Sous l'effet du couplage créé par les éléments non diagonaux en $\Omega_N/2$, les états $|g, N\rangle$ et $|e, N - 1\rangle$ d'énergies non perturbées séparées par $\hbar\delta$ (partie gauche

4. Un tel changement de phase se répercute sur les éléments non diagonaux de la matrice densité de sorte que, au bout du compte, les prévisions physiques restent inchangées.

de la Figure 2) se transforment en deux états $|\psi_+(N)\rangle$ et $|\psi_-(N)\rangle$ d'énergies $\hbar\lambda_{\pm}$ (partie droite de cette figure) :

$$\hbar\lambda_{\pm} = [E_e + (N - 1)\hbar\omega_L] + \frac{\hbar\delta}{2} \pm \frac{\hbar}{2}\sqrt{\Omega_N^2 + \delta^2} \quad (11)$$

Les nouveaux états $|\psi_+(N)\rangle$ et $|\psi_-(N)\rangle$ sont des superpositions linéaires des états initiaux ; ils sont appelés “états habillés”, et leurs énergies respectives $\hbar\lambda_{\pm}$ les “énergies habillées”. Nous allons voir dans ce complément qu'un grand nombre d'effets physiques intéressants qui se produisent lorsqu'un atome est couplé au mode laser peuvent être interprétés en termes de ces états habillés et de leurs énergies.

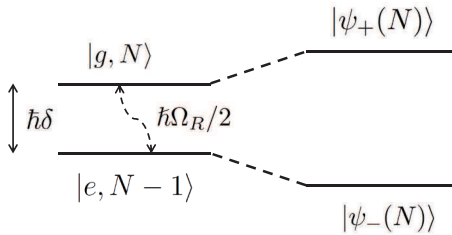


FIGURE 2 – Energies des états du système $A + L$ à l'intérieur de $\mathcal{E}(N)$, en l'absence de couplage (partie gauche de la figure), et en présence du couplage $\hbar\Omega_R/2$ entre les deux états initiaux (partie droite de la figure).

β . Oscillation de Rabi

Donnons un premier exemple particulièrement simple d'application de la méthode de l'atome habillé. Supposons par exemple que le système soit au temps $t = 0$ dans l'état $|g, N\rangle$:

$$|\psi(t = 0)\rangle = |\psi_{\text{in}}\rangle = |g, N\rangle \quad (12)$$

et cherchons la probabilité qu'il soit trouvé à un instant ultérieur t dans l'état :

$$|\psi_{\text{fin}}\rangle = |e, N - 1\rangle \quad (13)$$

L'évolution du système est celle d'un système à deux niveaux couplés par une perturbation statique $\hbar\Omega_R/2$. Ce problème est étudié en détail dans le § C du Chapitre IV. Pour le traiter, nous développons l'état initial sur les états $|\psi_{\pm}(N)\rangle$, et nous multiplions chacun d'entre eux par une exponentielle $e^{-i\lambda_{\pm}t}$ dont l'exposant contient son énergie $\hbar\lambda_{\pm}$:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\lambda_+t} \langle\psi_+(N)|g, N\rangle |\psi_+(N)\rangle + e^{-i\lambda_-t} \langle\psi_-(N)|g, N\rangle |\psi_-(N)\rangle \quad (14)$$

L'amplitude de probabilité de trouver le système dans l'état $|e, N - 1\rangle$ est alors :

$$\begin{aligned} \langle e, N - 1 | \psi(t) \rangle &\propto e^{-i\lambda t/2} \langle \psi_+(N) | g, N \rangle \langle e, N - 1 | \psi_+(N) \rangle \\ &+ e^{i\lambda t/2} \langle \psi_-(N) | g, N \rangle \langle e, N - 1 | \psi_-(N) \rangle \end{aligned} \quad (15)$$

où nous avons introduit la fréquence de Bohr :

$$\lambda = \lambda_+ - \lambda_- = \sqrt{\Omega_N^2 + \delta^2} \quad (16)$$

Dans (15), le signe \propto signifie simplement que nous avons supprimé un facteur de phase globale $e^{-i(\lambda_+ + \lambda_-)t/2}$, sans importance physique. La probabilité de trouver le système à l'instant t dans l'état final (13) est donc :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(t) &= |\langle e, N - 1 | \psi(t) \rangle|^2 \\ &= |C_+^g|^2 |C_+^e|^2 + |C_-^g|^2 |C_-^e|^2 + C_+^g (C_+^e)^* (C_-^g)^* C_-^e e^{-i\lambda t} + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (17)$$

où les C sont les produits scalaires :

$$C_{\pm}^g = \langle \psi_{\pm}(N) | g, N \rangle \quad \text{et} \quad C_{\pm}^e = \langle \psi_{\pm}(N) | e, N - 1 \rangle \quad (18)$$

et où c.c. symbolise le complexe conjugué.

Nous voyons donc que la probabilité $\mathcal{P}(t)$ est une fonction oscillante du temps, avec une fréquence λ qui est la seule fréquence de Bohr $\sqrt{\Omega_N^2 + \delta^2}$ du système à l'intérieur de la multiplicité \mathcal{E}_N . Il est clair que cette fréquence peut être développée à tous les ordres de la perturbation Ω_N^2 ; le résultat obtenu n'est donc visiblement pas perturbatif. L'oscillation que nous avons obtenue concerne le système total formé par un atome à deux niveaux placé dans un rayonnement monochromatique qui peut être intense et résonnant : partant de l'état $|g, N\rangle$, l'atome absorbe un photon et passe dans l'état $|e, N - 1\rangle$, puis revient dans l'état $|g, N\rangle$ par émission stimulée d'un photon, et ainsi de suite.

1-d. Sens physique du nombre de photons

La situation est différente suivant que l'atome est placé dans une vraie cavité ou dans l'espace libre.

Si l'atome est placé dans une vraie cavité, ce qui est le cas dans certaines expériences, les modes du champ sont les modes propres de la cavité. Une telle situation sera envisagée dans le § 4 ; le nombre N de photons a alors un sens physique parfaitement clair. Le volume L^3 , qui apparaît dans le développement des champs en modes et qu'on retrouve dans les expressions (6) et (9) ci-dessus, est en fait simplement le volume du mode de la cavité contenant des photons.

Si l'atome est dans l'espace libre, le volume L^3 introduit pour obtenir des modes discrets est juste un intermédiaire de calcul, sans sens physique précis. Une quantité ayant un sens physique est cependant la densité d'énergie au voisinage de l'atome, qui est proportionnelle à $N\hbar\omega_L/L^3$. A condition de garder N/L^3 constant, on peut donc changer arbitrairement N et L^3 sans modifier le couplage entre atome et champ ; ce dernier est caractérisé par la fréquence de Rabi Ω_N , qui dépend de \sqrt{N}/L^3 . Dans ce cas, le nombre N de photons n'a donc pas de sens physique intrinsèque.

Supposons par exemple que le champ soit dans un état cohérent (Complément G_V). Les valeurs de N sont distribuées autour d'une valeur moyenne $\langle N \rangle$ dans un intervalle de largeur $\Delta N = \sqrt{\langle N \rangle}$, très faible en valeur relative devant $\langle N \rangle$, mais très grand en valeur absolue. Si l'on fait tendre N et L^3 vers l'infini en gardant N/L^3 constant, la fréquence de Rabi Ω_N varie très peu en valeur relative quand N varie sur une grande plage autour de $\langle N \rangle$. On peut donc dans (10) remplacer Ω_N par une constante Ω_R indépendante de N :

$$\Omega_N \simeq \Omega_R \quad (19)$$

C'est ce que nous ferons dans ce qui suit ainsi que dans le § 3.

1-e. Effets de l'émission spontanée

Jusqu'à maintenant nous avons ignoré tous les autres modes du champ autres que le mode laser. Cependant, lorsque l'atome est dans l'état excité e , il peut émettre par émission spontanée un photon dans un autre mode. En plus de l'atome A et du mode laser L , il faut donc prendre en compte le système R formé par l'ensemble des modes qui, initialement, ne contiennent aucun photon. Comme R est un grand système (parfois appelé pour cette raison "réservoir"), les effets du couplage entre $A + L$ et R doivent être décrits par une équation appelée "équation pilote"; cette dernière décrit l'évolution de l'opérateur densité σ_{A+L} de $A + L$ sous l'effet de ce couplage (voir la partie D du Chapitre VI de [20]). Nous n'introduisons pas ici cette équation pilote, nous contentant de discuter l'interprétation physique des résultats auxquels elle conduit.

Comme le spectre de fréquence du réservoir R a une largeur $\Delta\omega$ qui est de l'ordre de la fréquence optique, le temps de corrélation associé $\tau_c \simeq 1/\Delta\omega$ est beaucoup plus court que tous les autres temps caractéristiques du problème. Il est en particulier plus court que le temps τ_R de durée de vie radiative :

$$\tau_R = \frac{1}{\Gamma} \quad (20)$$

où Γ est la largeur naturelle du niveau excité e ; il est également plus court que l'inverse de la fréquence de Rabi, qui donne le temps caractéristique de couplage au mode laser. Donc, quand le système $A + L$ est dans l'état $|e, N - 1\rangle$ et qu'une émission spontanée se produit, elle dure un temps trop court pour que l'atome ait le temps de se coupler à L . Le système passe donc de façon quasi instantanée de l'état $|e, N - 1\rangle$, qui appartient à $\mathcal{E}(N)$, à l'état $|g, N - 1\rangle$ dans la multiplicité inférieure $\mathcal{E}(N - 1)$ – cf. Figure 1. On peut alors montrer (cf. § C.3 du Chapitre III de [20]) que l'évolution à l'intérieur de $\mathcal{E}(N)$ peut être décrite par les mêmes équations que plus haut, à la simple condition d'ajouter un terme imaginaire à l'énergie E_e de l'état excité :

$$E_e \implies E_e - i\hbar \frac{\Gamma}{2} \quad (21)$$

Compte tenu de ce qui précède, pour décrire l'évolution du système $A + L$ à l'intérieur⁵ de $\mathcal{E}(N)$ en tenant compte des processus d'émission spontanée, il faut

5. Il existe également d'autres effets importants induits par le couplage avec le réservoir qui donnent naissance à des transitions entre multiplicités différentes. C'est par exemple le cas du phénomène de fluorescence étudié au § 3-c.

remplacer l'hamiltonien $H_{AL}^{(N)}$ écrit en (10) par l'hamiltonien effectif non hermitique :

$$\left(H_{\text{eff}}^{(N)}\right) = [E_e + (N - 1)\hbar\omega_L] \mathbb{1} + \hbar \begin{pmatrix} \delta & \Omega_R/2 \\ \Omega_R/2 & -i\Gamma/2 \end{pmatrix} \quad (22)$$

A cause du terme imaginaire $-i\Gamma/2$ qui figure dans la matrice, les deux valeurs propres de $H_{\text{eff}}^{(N)}$ ont également une partie imaginaire. Il s'ensuit que les deux états habillés sont maintenant instables, à cause de l'effet de l'émission spontanée de photons qui peut se produire à partir de chacun de ces niveaux.

A un terme constant près, donné par le terme proportionnel à $\mathbb{1}$ dans le second membre de (22), les valeurs propres $\hbar\lambda_{\pm}$ de H_{eff} s'obtiennent en diagonalisant la matrice de dimension 2 dans le second membre de (22). Ceci peut être fait exactement et fournit⁶ :

$$\lambda_{\pm} = -i\frac{\Gamma}{4} + \frac{\delta}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\Omega_R^2 + \left(\delta + i\frac{\Gamma}{2}\right)^2} \quad (23)$$

Nous allons discuter la signification physique de ces résultats dans deux cas limites.

Remarque :

Cette relation est développable à tous les ordres en $\Omega_R/|\delta|$ et Ω_R/Γ . C'est en ce sens que la méthode de l'atome habillé est non perturbative.

2. Domaine des couplages faibles

Nous commençons par étudier le domaine des couplages faibles, pour lequel le lien avec les résultats du Chapitre XX est plus direct.

2-a. Valeurs propres et vecteurs propres de l'hamiltonien effectif

Considérons tout d'abord le cas où le couplage non diagonal $\hbar\Omega_R/2$ entre les deux états non perturbés de $\mathcal{E}(N)$ est petit devant la différence entre les énergies de ces deux états (y compris le terme imaginaire associé à la largeur naturelle de e). Comme cette différence est complexe, on prend son module :

$$\Omega_R \ll \left| \delta + i\frac{\Gamma}{2} \right| \quad (24)$$

Cette inégalité est satisfaite si :

$$\Omega_R \ll \Gamma \quad \text{ou} \quad \Omega_R \ll |\delta| \quad (25)$$

Le domaine du couplage faible est donc obtenu aux faibles intensités lumineuses ou aux grands désaccords.

6. Pour plus de concision, nous utilisons ici une notation mathématique légèrement incorrecte, puisque le signe racine carrée doit en principe porter sur un nombre réel et positif. Par la racine carrée qui est écrite au second membre de (23), nous entendons l'un quelconque des deux nombres complexes dont le carré est le nombre complexe sous le signe racine.

Quand le couplage est faible, on peut appliquer la théorie des perturbations pour obtenir les corrections d'ordre 2 en Ω_R aux énergies des états $|g, N\rangle$ et $|e, N-1\rangle$. On obtient ainsi à partir de (22) la correction $\delta E_{g,N}$ à l'énergie de l'état $|g, N\rangle$:

$$\delta E_{g,N} = \hbar \frac{(\Omega_R/2)^2}{\delta + i\Gamma/2} = \hbar\delta_g - i\hbar \frac{\gamma_g}{2} \quad (26)$$

où :

$$\delta_g = \frac{\delta}{4\delta^2 + \Gamma^2} \Omega_R^2 \quad \text{et} \quad \gamma_g = \frac{\Gamma}{4\delta^2 + \Gamma^2} \Omega_R^2 \quad (27)$$

Un calcul analogue donnerait pour la correction à l'énergie de l'état $|e, N-1\rangle$:

$$\delta E_{e,N-1} = -\hbar\delta_g + i\hbar \frac{\gamma_g}{2} \quad (28)$$

On obtient ainsi les valeurs propres approchées de l'hamiltonien effectif (22) sous la forme :

$$\begin{aligned} \lambda_+ &\simeq \delta + \delta_g - i\frac{\gamma_g}{2} + \dots \\ \lambda_- &\simeq -\delta_g - i\frac{\Gamma}{2} + i\frac{\gamma_g}{2} + \dots \end{aligned} \quad (29)$$

qui coïncide avec un développement du résultat exact (23) en puissances de Ω_R/Γ .

La théorie des perturbations permet également de calculer les états propres de H_{eff} à l'ordre 1 en Ω_R . L'état $|\overline{g, N}\rangle$ qui tend vers $|g, N\rangle$ quand Ω_R tend vers 0 s'écrit :

$$|\overline{g, N}\rangle = |g, N\rangle + \frac{(\Omega_R/2)}{\delta + i\Gamma/2} |e, N-1\rangle \quad (30)$$

Ainsi, l'état $|\overline{g, N}\rangle$ est "contaminé" par l'état $|e, N-1\rangle$. Un calcul analogue donnerait pour l'état $|\overline{e, N-1}\rangle$ tendant vers $|e, N-1\rangle$ quand Ω tend vers zéro :

$$|\overline{e, N-1}\rangle = |e, N-1\rangle - \frac{(\Omega_R/2)}{\delta + i\Gamma/2} |g, N\rangle \quad (31)$$

2-b. Déplacements lumineux et élargissement radiatif

Les parties réelles de $\delta E_{g,N}$ et $\delta E_{e,N-1}$ représentent des déplacements de niveaux induits par le couplage et appelés pour cette raison "déplacements lumineux" (ou "*light-shifts*" en anglais). La partie imaginaire de $\delta E_{g,N}$ représente un élargissement radiatif de l'état $|g, N\rangle$, qui devient donc instable sous l'effet du couplage. La partie imaginaire de $\delta E_{e,N-1}$ décrit une réduction de la largeur radiative $\hbar\Gamma$ de l'état $|e, N-1\rangle$.

La partie gauche de la Figure 3 représente les états non perturbés $|g, N\rangle$ et $|e, N-1\rangle$ de la multiplicité $\mathcal{E}(N)$. Ils sont séparés par un écart $\hbar\delta$; si δ est positif, l'état $|g, N\rangle$ est au-dessus de l'état $|e, N-1\rangle$; si δ est négatif, c'est au contraire l'état $|e, N-1\rangle$ qui est au-dessus de l'état $|g, N\rangle$. La largeur du trait épais représentant l'état $|e, N-1\rangle$ schématise sa largeur naturelle $\hbar\Gamma$. La partie droite de la figure représente les états perturbés par l'effet du couplage. Les deux états se repoussent,

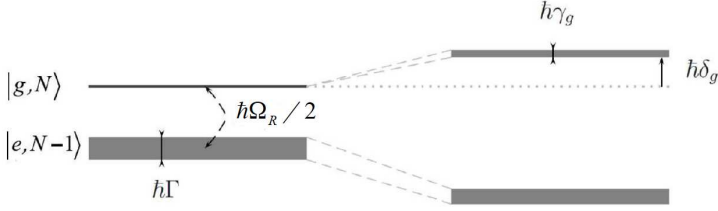


FIGURE 3 – États non perturbés (partie gauche de la figure) et états perturbés (partie droite) dans la multiplicité $\mathcal{E}(N)$. Sous l'effet du couplage caractérisé par la fréquence de Rabi Ω_R , l'état $|g, N\rangle$ est déplacé d'une quantité $\hbar\delta_g$ (déplacement lumineux de l'état fondamental g) ; sa fonction d'onde est "contaminée" par celle de l'état instable $|e, N - 1\rangle$, de sorte que l'état fondamental devient lui aussi instable et acquiert un élargissement radiatif $\hbar\gamma_g$. L'état $|e, N - 1\rangle$ est déplacé dans le sens opposé à celui de $|g, N\rangle$; sa largeur est réduite de $\hbar\Gamma$ à $\hbar(\Gamma - \gamma_g)$.

ce qui fait apparaître des déplacements lumineux de signes opposés pour $|g, N\rangle$ et $|e, N - 1\rangle$. Le déplacement $\hbar\delta_g$ de $|g, N\rangle$ est positif si $|g, N\rangle$ est au-dessus de $|e, N\rangle$, c'est-à-dire si δ est positif ; il est négatif si δ est négatif. L'état stable $|g, N\rangle$ est également "contaminé" par l'état instable $|e, N - 1\rangle$, ce qui lui confère une instabilité décrite par l'élargissement radiatif $\hbar\gamma_g$. Un atome dans l'état g n'y restera donc pas indéfiniment : il quittera cet état avec une probabilité par unité de temps γ_g , qui peut donc aussi être interprétée comme le taux d'absorption d'un photon par un atome dans l'état g . Sous l'effet de la "contamination" de l'état instable $|e, N - 1\rangle$ par l'état stable $|g, N\rangle$, l'instabilité de $|e, N - 1\rangle$ diminue et sa largeur est réduite de $\hbar\Gamma$ à $\hbar(\Gamma - \gamma_g)$.

2-c. Variations avec l'intensité incidente et le désaccord

Les déplacements $\hbar\delta_g$ et les élargissements radiatifs $\hbar\gamma_g$ donnés par l'équation (27) sont proportionnels à Ω_R^2 , donc au nombre de photons incidents, c'est-à-dire encore à l'intensité lumineuse. Ils varient avec le désaccord δ respectivement comme des courbes de dispersion et d'absorption de Lorentz (Fig. 4).

Quand le désaccord est très grand en module devant la largeur naturelle de e ($|\delta| \gg \Gamma$), on peut négliger Γ^2 devant $4\delta^2$ dans les dénominateurs des expressions (27), ce qui donne :

$$|\delta_g| = \frac{\Omega_R^2}{4|\delta|} \quad \gamma_g = \frac{\Omega_R^2 \Gamma}{4\delta^2} \quad (32)$$

On en déduit que :

$$\gamma_g = |\delta_g| \frac{\Gamma}{|\delta|} \ll |\delta_g| \quad (33)$$

Aux grands désaccords, les déplacements lumineux sont donc bien supérieurs aux élargissements radiatifs.

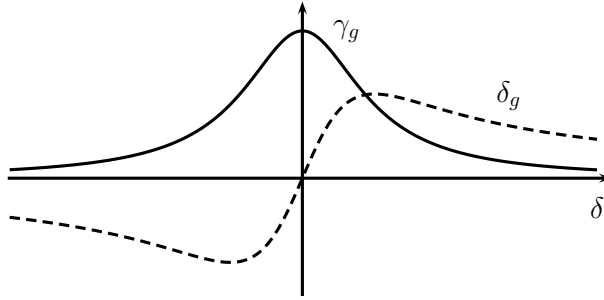


FIGURE 4 – Variations avec le désaccord δ entre la fréquence du laser et la fréquence atomique du déplacement lumineux $\hbar\delta_g$ (courbe en traits tiretés) et de l’élargissement radiatif $\hbar\gamma_g$ (courbe en trait plein).

2-d. Interprétation semi-classique dans le domaine des couplages faibles

Dans ce régime des couplages faibles, la réponse de l’atome au champ incident est linéaire; on peut donner une interprétation semi-classique des effets précédents en termes de dipôle induit par le champ incident (voir par exemple [48]). Ce dipôle possède une composante en phase avec le champ et une composante en quadrature, reliées au champ par une polarisabilité dynamique $\alpha(\omega)$.

La composante en quadrature absorbe de l’énergie du champ. Elle varie avec le désaccord δ comme une courbe d’absorption; c’est elle qui est responsable du taux d’absorption associé à l’élargissement radiatif γ_g . La composante en phase du dipôle donne naissance à une énergie de polarisation. Elle dépend du désaccord comme une courbe de dispersion, et est responsable du déplacement lumineux. Ce dernier est analogue au déplacement Stark résultant de l’interaction d’un champ électrique statique avec le dipôle statique qu’il induit. C’est la raison pour laquelle le déplacement lumineux est souvent appelé “effet Stark dynamique”.

2-e. Quelques généralisations

Nous examinons maintenant quelques généralisations directes, mais importantes, de l’étude précédente.

\alpha. Rayonnement incident non monochromatique

Supposons que l’état du rayonnement soit un état de Fock $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$, ou un mélange statistique de tels états; la distribution spectrale du rayonnement est alors décrite par la fonction $I(\omega_L)$. Au second ordre de la théorie des perturbations (domaine des couplages faibles), les processus qui interviennent dans les déplacements lumineux et élargissements radiatifs sont des absorptions et ré-émissions induites de photons. Si plusieurs modes contiennent des photons et si l’état du rayonnement est un état de Fock, le photon doit être ré-émis de manière stimulée dans le même mode que celui où il a été absorbé (sinon, l’élément de matrice donnant l’effet du couplage au second ordre serait nul). Les effets des divers modes du champ peuvent donc être ajoutés indépendamment et l’on obtient pour δ_g et γ_g les expres-

sions :

$$\begin{aligned}\delta_g &\propto \int d\omega_L |D_{eg}|^2 I(\omega_L) \frac{\delta}{4\delta^2 + \Gamma^2} \\ \gamma_g &\propto \int d\omega_L |D_{eg}|^2 I(\omega_L) \frac{\Gamma}{4\delta^2 + \Gamma^2}\end{aligned}\quad (34)$$

β. Etat fondamental dégénéré

Si l'état fondamental g a un moment cinétique J_g non nul et comporte plusieurs sous-niveaux Zeeman m_g , on peut montrer [49] que les sous-niveaux de g ayant un déplacement lumineux et un élargissement radiatif bien définis sont obtenus en diagonalisant la matrice hermitique d'éléments :

$$\sum_{m_e} \langle m_g | \vec{\varepsilon}_L^* \cdot \vec{D} | m_e \rangle \langle m_e | \vec{\varepsilon}_L \cdot \vec{D} | m'_g \rangle. \quad (35)$$

où les états m_e sont les sous-niveaux de e . Les états propres $|g_\alpha\rangle$ de cette matrice, de valeurs propres λ_α , subissent des déplacements $\lambda_\alpha \delta_g$ et des élargissements $\lambda_\alpha \gamma_g$ (où δ_g et γ_g sont les déplacements et élargissements pour un atome à deux niveaux).

On trouvera dans la référence [50] une discussion des propriétés de symétrie de la matrice (35) et de l'équivalence entre les déplacements lumineux et l'effet de champs magnétiques et électriques fictifs agissant dans la multiplicité fondamentale de l'atome. Nous nous contenterons ici de discuter le cas simple d'une transition $J_g = 1/2 \leftrightarrow J_e = 1/2$ qui est, par exemple, celui de la composante hyperfine $F = 1/2 \leftrightarrow F = 1/2$ de la transition $6^1S_0 \leftrightarrow 6^3P_1$ de l'isotope 199 du mercure ($\lambda_L = 253.7$ nm). C'est sur une telle transition que les déplacements lumineux ont été observés pour la première fois [51].

La partie gauche de la Figure 5 montre les composantes σ_+ et σ_- de cette transition reliant respectivement $m_g = -1/2$ à $m_e = +1/2$ et $m_g = +1/2$ à $m_e = -1/2$. Si la polarisation du faisceau lumineux est σ_+ , le déplacement lumineux de $m_g = -1/2$ est non nul et bien défini, car l'absorption et la ré-émission d'un photon σ_+ ne peut relier le sous-niveau $m_g = -1/2$ qu'à lui-même. Par contre, le sous-niveau $m_g = +1/2$ n'est pas déplacé, car il n'existe pas de transition optique σ_+ partant de $m_g = +1/2$. Les conclusions sont inversées si la polarisation du faisceau lumineux est σ_- : le déplacement du sous-niveau $m_g = +1/2$ est bien défini et le sous-niveau $m_g = -1/2$ n'est pas déplacé. Or les coefficients de Clebsch-Gordan (Complément B_X) des transitions σ_+ et σ_- sont égaux par symétrie ; les déplacements lumineux ont donc la même valeur pour une excitation σ_+ du sous-niveau $m_g = -1/2$ et pour une excitation σ_- de même intensité du sous-niveau $m_g = +1/2$.

En présence d'un champ magnétique statique, il existe un écart d'énergie entre les deux sous-niveaux $m_g = \pm 1/2$ de l'atome (effet Zeeman). On voit sur la partie droite de la Figure 5 qu'une excitation lumineuse non résonnante change cet écart de quantités égales et opposées⁷ suivant qu'elle a une polarisation σ_+ ou σ_- . La raie de résonance magnétique dans l'état fondamental, détectée par des méthodes optiques utilisant un faisceau résonnant (Complément C_{XIX}, § 2-b), est donc déplacée quand on applique un second faisceau non résonnant ; ce déplacement prend des signes opposés selon que ce faisceau a une polarisation σ_+ ou σ_- . Comme les temps

7. On suppose que le désaccord δ est grand devant l'écart Zeeman.

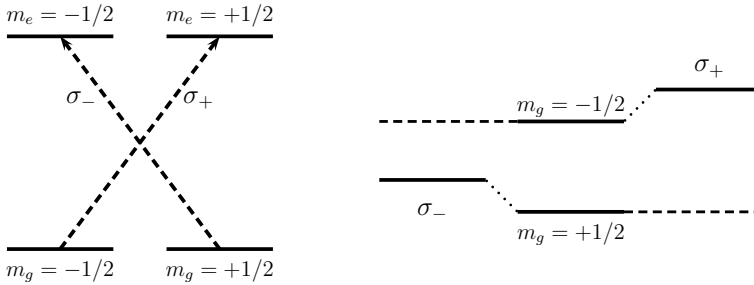


FIGURE 5 – La partie gauche de la figure montre la transition $J_g = 1/2 \rightarrow J_e = 1/2$, ses sous-niveaux Zeeman, ainsi que les polarisations des faisceaux lumineux qui induisent des transitions entre eux. Dans le schéma de la partie droite, le centre représente les niveaux d'énergie de l'état fondamental en l'absence de faisceau lumineux (niveaux Zeeman dans un champ magnétique statique); les deux extensions latérales indiquent leurs déplacements énergétiques sous l'effet d'un faisceau lumineux non résonnant, soit de polarisation σ_+ , soit de polarisation σ_- . Dans le premier cas, c'est le sous-niveau $m_g = -1/2$ qui est sélectivement déplacé, dans le second cas c'est le sous-niveau $m_g = +1/2$. C'est pourquoi, suivant que la polarisation du faisceau est σ_+ ou σ_- , la modification de l'écart énergétique entre les deux sous-niveaux Zeeman change de signe.

de relaxation dans l'état fondamental peuvent être très longs, la raie de résonance magnétique dans l'état fondamental est très étroite, ce qui permet de détecter des déplacements lumineux très petits, de l'ordre du Hz. C'est ainsi que les déplacements lumineux ont pu être mis en évidence en 1961, à une époque où les sources laser n'étaient pas encore disponibles dans les laboratoires [51]. Avec de telles sources, il est maintenant courant d'observer des déplacements de l'ordre de 10^6 Hz, voire plus.

3. Domaine des couplages forts

Nous examinons maintenant comment les résultats précédents sont modifiés dans le régime des couplages forts.

3-a. Valeurs propres et vecteurs propres de l'hamiltonien effectif

On est dans le domaine des couplages forts lorsque l'élément non diagonal $\hbar\Omega_R/2$ de l'hamiltonien effectif donné en (22) est grand devant la différence entre les deux éléments diagonaux :

$$\Omega_R \gg |\delta| \quad \text{et} \quad \Omega_R \gg \Gamma \quad (36)$$

Pour simplifier la discussion, nous nous limiterons au cas résonnant ($\delta = 0$). L'équation (23), qui donne les valeurs propres de la matrice 2×2 de (22) pour toute valeur de Ω_R , devient dans ce cas :

$$\lambda_{\pm} = -i\frac{\Gamma}{4} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Omega_R^2 - \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (37)$$

où, à nouveau, nous utilisons la notation concise de la racine carrée d'un nombre qui n'est pas toujours positif (cf. note 6).

Tant que $\Omega_R < \Gamma/2$, le dernier terme du second membre de (37) est imaginaire pur. Il en est de même des deux valeurs propres λ_{\pm} , qui sont égales à :

$$\lambda_{\pm} = -i \left[\frac{\Gamma}{4} \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\Gamma^2}{4} - \Omega_R^2} \right] \quad (38)$$

Si de plus $\Omega_R \ll \Gamma$, un développement limité de (38) en puissances de Ω_R/Γ donne $\lambda_+ = -i\gamma_g/2$ et $\lambda_- = -i(\Gamma - \gamma_g)/2$; on retrouve bien les résultats du § précédent pour le couplage faible. Quand Ω_R augmente tout en restant inférieur à $\Gamma/2$, la valeur propre λ_+ augmente tandis que λ_- diminue, leur somme ($\lambda_+ + \lambda_-$) restant constante et égale à $-i\Gamma/2$. Quand Ω_R atteint la valeur $\Gamma/2$, les deux valeurs propres λ_{\pm} sont toutes deux égales à $-i\Gamma/4$.

Dès que Ω_R devient supérieur à $\Gamma/2$, le dernier terme de (37) devient réel. Les deux valeurs propres λ_{\pm} ont des parties réelles opposées et la même partie imaginaire égale à $-i\Gamma/4$; les deux niveaux habillés ont alors toujours la même largeur $\Gamma/4$. Quand le couplage devient fort ($\Omega_R \gg \Gamma$), les énergies valent :

$$\lambda_{\pm} \simeq -i\frac{\Gamma}{4} \pm \frac{\Omega_R}{2} \quad (39)$$

et les vecteurs propres tendent vers les combinaisons linéaires symétrique et anti-symétrique de $|g, N\rangle$ et $|e, N-1\rangle$:

$$|\psi_{\pm}(N)\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [|g, N\rangle \pm |e, N-1\rangle] \quad (40)$$

De tels états ne peuvent plus être considérés comme obtenus par une légère contamination mutuelle des états non perturbés de la multiplicité $\mathcal{E}(N)$. Ils sont d'ailleurs *intriqués*, donc impossibles à considérer comme des produits d'un état atomique par un état du champ. Ces états du système global atome + champ sont couramment appelés états de *l'atome habillé par le champ*.

3-b. Variation des énergies des états habillés avec le désaccord

La Figure 6 représente en traits pleins la variation des énergies des états habillés $|\psi_{\pm}(N)\rangle$ en fonction de $\hbar\omega_L$. On repère les énergies par rapport à celle de l'état non perturbé $|e, N-1\rangle$ prise égale à $\hbar\omega_0$, et donc représentée par une droite horizontale d'ordonnée $\hbar\omega_0$. Par rapport à cette énergie, celle de l'état $|g, N\rangle$ est égale à $\hbar\omega_L$ et se représente donc par une droite de pente unité coupant l'horizontale représentant l'énergie de $|e, N-1\rangle$ au point d'abscisse $\hbar\omega_0$.

À résonance ($\omega_L = \omega_0$), les deux états habillés $|\psi_{\pm}(N)\rangle$ sont séparés par une énergie $\hbar\Omega_R$, puisque nous supposons ici que s'applique le domaine des couplages forts où $\Omega_R \gg \Gamma$. Commençons par négliger complètement Γ . Si l'on s'écarte de résonance en prenant des désaccords de plus en plus grands en module, on finit par atteindre des régions où $|\delta|$ devient plus grand que Ω_R , ce qui correspond à une situation où le couplage est faible. En faisant varier le désaccord, on passe ainsi continûment d'une région de couplage fort à une région de couplage faible. Les énergies des niveaux habillés $|\psi_{\pm}(N)\rangle$ forment une hyperbole admettant pour asymptotes les

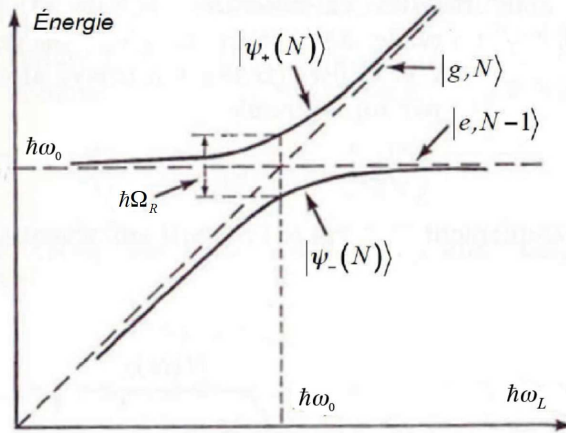


FIGURE 6 – Énergies des états habillés $|\psi_{\pm}(N)\rangle$ (traits pleins) et des états non perturbés $|g, N\rangle$ et $|e, N - 1\rangle$ (traits tiretés) en fonction de $\hbar\omega_L$. Les énergies sont repérées par rapport à celle de l'état non perturbé $|e, N - 1\rangle$, prise égale à $\hbar\omega_0$. Quand $\hbar\omega_L$ varie, les énergies des états habillés forment une hyperbole dont les asymptotes sont les droites représentant les énergies des états non perturbés (anti-croisement).

énergies des états non perturbés $|g, N\rangle$ et $|e, N - 1\rangle$ (Figure 6). Près des asymptotes, les états habillés sont très proches des états non couplés correspondant à ces asymptotes, et la distance entre l'hyperbole et son asymptote n'est autre que le déplacement lumineux δ_g défini en (27).

Si l'on tenait compte de la largeur naturelle Γ du niveau excité e , il faudrait ajouter une largeur aux niveaux habillés représentés sur la Figure 6. Loin du centre de l'anti-croisement, près des asymptotes, la largeur serait $\Gamma - \gamma_g$ pour les états habillés près de l'asymptote horizontale, et γ_g pour les états habillés près de l'asymptote de pente unité. Lors d'un déplacement continu le long de l'une des branches de l'hyperbole, la largeur passe d'une valeur à l'autre en prenant la valeur $\Gamma/4$ au centre de l'anti-croisement.

Un autre phénomène intéressant se produit quand le système suit continûment l'une des branches de l'hyperbole. Supposons qu'il se déplace sur la branche inférieure de l'hyperbole, de la gauche vers la droite. Si le passage est suffisamment lent pour que l'on puisse négliger toute transition non adiabatique vers l'autre niveau habillé, c'est-à-dire vers l'autre branche de l'hyperbole, on passe continûment de l'état $|g, N\rangle$ à l'état $|e, N - 1\rangle$. Il s'agit là d'une autre façon commode de passer de g à e : plutôt que d'appliquer le champ à résonance pendant un temps tel que l'oscillation de Rabi amène le système de g à e (impulsion π), on balaye lentement la fréquence du champ d'une valeur inférieure à la valeur de résonance à une valeur supérieure. Cependant, le balayage ne doit pas être trop lent non plus, car il doit se faire à une échelle de temps qui reste plus courte que celle des processus dissipatifs qui changent l'état interne de l'atome. Un tel passage est souvent appelé “*passage adiabatique rapide*”, car il doit être à la fois suffisamment lent pour rester adiabatique et suffisamment rapide pour éviter toute dissipation pendant le temps de passage. L'approche de

l'atome habillé permet donc de clairement préciser les conditions permettant de transférer l'atome d'un niveau à l'autre.

3-c. Triplet de fluorescence

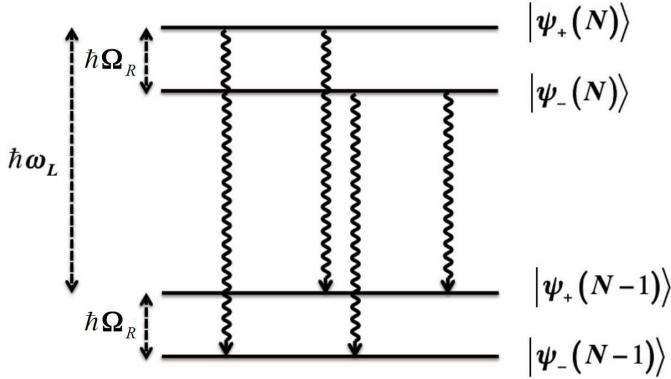


FIGURE 7 – Transitions radiatives reliant l'un des deux états $|\psi_{\pm}(N)\rangle$ de la multiplicité $\mathcal{E}(N)$ à l'un des deux états $|\psi_{\pm}(N-1)\rangle$ de la multiplicité $\mathcal{E}(N-1)$ située à une distance $\hbar\omega_L$ au-dessous de $\mathcal{E}(N)$. Le rayonnement excitateur est supposé exactement résonnant, de sorte que les deux états $|\psi_{\pm}\rangle$ de chaque multiplicité sont séparés par un intervalle $\hbar\Omega_R$.

La méthode de l'atome habillé permet également de rendre compte simplement du spectre des raies émises spontanément par l'atome lorsque ce dernier est soumis à un rayonnement intense. Dans le § E-1 du Chapitre XX consacré à l'étude la diffusion élastique, nous avons vu que le rayonnement émis spontanément par l'atome a la même fréquence que le rayonnement excitateur lorsque l'intensité de ce dernier est suffisamment faible pour qu'un traitement perturbatif soit suffisant. Nous allons voir que la situation est différente lorsque le rayonnement excitateur est intense : de nouvelles fréquences apparaissent dans la lumière émise par l'atome⁸.

Supposons le rayonnement excitateur résonnant et intense, de sorte que les deux niveaux habillés $|\psi_{\pm}(N)\rangle$ de la multiplicité $\mathcal{E}(N)$ sont séparés par un intervalle $\hbar\Omega_R$ (Figure 7). Ces deux états sont des superpositions linéaires des états $|g, N\rangle$ et $|e, N-1\rangle$; en conséquence, ils ont tous deux une projection non nulle sur $|e, N-1\rangle$. De même, les deux états $|\psi_{\pm}(N-1)\rangle$ de la multiplicité $\mathcal{E}(N-1)$ sont des superpositions linéaires des états $|g, N-1\rangle$ et $|e, N-2\rangle$; ils ont tous deux une projection non nulle sur $|g, N-1\rangle$. Les raies émises spontanément par l'atome sont celles qui relient deux niveaux d'énergie entre lesquels l'opérateur dipôle atomique \mathbf{D} a un élément de matrice non nul. Comme \mathbf{D} ne change pas le nombre de photons N et peut relier e à g , l'élément de matrice $\langle g, N-1 | \mathbf{D} | e, N-1 \rangle$ est non nul ; chacun des deux états $|\psi_{\pm}(N)\rangle$ peut être relié par \mathbf{D} à chacun des deux états $|\psi_{\pm}(N-1)\rangle$. Les quatre

8. Il ne s'agit pas d'une diffusion Raman car nous supposons ici qu'il n'y a pas d'autres niveaux atomiques que e et g .

transitions radiatives représentées par des flèches ondulées sur la Figure 7 sont donc permises et correspondent à trois fréquences distinctes : la fréquence $\omega_L + \Omega$ pour la transition $|\psi_+(N)\rangle \rightarrow |\psi_-(N-1)\rangle$; la fréquence ω_L pour les deux transitions $|\psi_+(N)\rangle \rightarrow |\psi_+(N-1)\rangle$ et $|\psi_-(N)\rangle \rightarrow |\psi_-(N-1)\rangle$; la fréquence $\omega_L - \Omega$ pour la transition $|\psi_-(N)\rangle \rightarrow |\psi_+(N-1)\rangle$. Il apparaît ainsi un triplet de fréquences pour la lumière émise spontanément, prédit la première fois par Mollow [52] à partir d'un traitement semi-classique.

Doublet Autler-Townes

Supposons que l'un des deux états atomiques considérés jusqu'ici, par exemple g , soit relié par une transition permise à un troisième état c , de sorte que $\langle c|\mathbf{D}|g\rangle$ est non nul. Supposons aussi que la fréquence ω_L du rayonnement qui excite de manière résonnante la transition $g \rightarrow e$ soit très non résonnante pour la transition $g \rightarrow c$; elle ne perturbe donc pas l'état c et les états $|c, N\rangle$ peuvent être considérés comme des états propres de l'hamiltonien total, éventuellement légèrement déplacés. Les deux états $|\psi_{\pm}(N)\rangle$ qui ont tous deux une projection non nulle sur $|g, N\rangle$ peuvent donc être reliés par \mathbf{D} à $|c, N\rangle$. On en déduit que la transition $g \rightarrow c$ est dédoublée en deux raies séparées de $\hbar\Omega$ par la présence d'un rayonnement intense qui excite la transition $g \rightarrow e$. On parle alors de "doublet Autler-Townes" [53].

3-d. Corrélations temporelles entre les photons de fluorescence

Nous étudions maintenant les caractéristiques temporelles du rayonnement émis spontanément par l'atome lorsqu'il est en constante interaction avec le champ électromagnétique incident du laser.

α . La cascade radiative de l'atome habillé

Nous avons vu que l'émission spontanée d'un photon fait passer l'atome habillé d'une multiplicité $\mathcal{E}(N)$ à la multiplicité $\mathcal{E}(N-1)$ située immédiatement au-dessous, à une distance $\hbar\omega_L$. Une étude précise de l'évolution du système physique quand il quitte la multiplicité $\mathcal{E}(N)$ nécessiterait de recourir à l'équation pilote, déjà mentionnée au § 1-e. Nous nous contenterons ici d'une discussion qualitative, mais le lecteur intéressé par une approche plus détaillée pourra consulter le § D du Chapitre VI de [20].

Une fois dans $\mathcal{E}(N-1)$, l'atome peut émettre spontanément un nouveau photon, ce qui fait passer l'atome habillé dans $\mathcal{E}(N-2)$, et ainsi de suite. La succession des photons émis spontanément par l'atome constamment excité par le rayonnement laser crée ainsi une "cascade radiative" de l'atome habillé descendant son diagramme d'énergie.

L'image de cette cascade radiative permet d'étudier les corrélations temporelles entre les photons émis par l'atome. Comme nous allons le voir, les corrélations observées dépendent de la résolution spectrale des photodétecteurs utilisés.

β . Photodétection à grande résolution spectrale

Avec une résolution spectrale suffisante, on peut observer des corrélations temporelles entre les photons émis dans les deux bandes latérales du triplet. Supposons en effet que des filtres soient placés devant les photodétecteurs, de façon que chacun d'entre eux ne reçoive qu'une composante du triplet de fluorescence, dont les

fréquences sont centrées à ω_L , $\omega_L + \Omega_R$ et $\omega_L - \Omega_R$. La résolution spectrale de l'appareillage est alors meilleure que la séparation en fréquence Ω_R de ce triplet, mais n'a pas besoin d'être comparable à la largeur naturelle Γ de chacune de ces composantes. Si nous appelons $\delta\omega$ cette résolution spectrale, nous avons donc :

$$\Gamma < \delta\omega < \Omega_R \quad (41)$$

Supposons qu'un détecteur enregistre à un instant donné un photon, émis par exemple dans la bande latérale centrée en $\omega_L + \Omega_R$ lors de la transition $|\Psi_+(N)\rangle \rightarrow |\Psi_-(N-1)\rangle$ (flèche ondulée à gauche de la Figure 7). Le prochain photon est émis par le système à partir de $|\Psi_-(N-1)\rangle$ et donne lieu, soit à la transition $|\Psi_-(N-1)\rangle \rightarrow |\Psi_-(N-2)\rangle$ avec un photon de fréquence ω_L , soit à la transition $|\Psi_-(N-1)\rangle \rightarrow |\Psi_+(N-2)\rangle$ avec un photon de fréquence $\omega_L - \Omega_R$. Il s'ensuit qu'un second photon de même fréquence $\omega_L + \Omega_R$ que le premier ne peut pas être émis immédiatement après le premier.

Si la fréquence de ce second photon est ω_L , le système arrive dans l'état $|\Psi_-(N-2)\rangle$; à partir de là il peut émettre, soit un troisième photon de même fréquence ω_L , soit un troisième photon de fréquence plus faible $\omega_L - \Omega_R$. Si en revanche la fréquence de ce second photon est $\omega_L - \Omega_R$, le système arrive dans l'état $|\Psi_+(N-2)\rangle$; à partir de là il peut émettre, soit un photon de fréquence plus grande $\omega_L + \Omega_R$, soit un photon de fréquence ω_L . Contrairement au second, le troisième photon peut donc avoir la même fréquence $\omega_L + \Omega_R$ que le premier. Par le même raisonnement, on vérifie que, si le premier photon a la fréquence $\omega_L - \Omega_R$, ce ne peut pas être le cas du second; il faut attendre le troisième photon pour pouvoir obtenir la même fréquence $\omega_L - \Omega_R$. Ainsi, si seuls les photons aux deux fréquences extrêmes $\omega_L \pm \Omega_R$ sont observés, les deux processus d'émission qui sont détectés sont nécessairement alternés dans le temps (mais ces événements peuvent être séparés par un nombre arbitraire d'émissions de photons de fréquence centrale ω_L).

Remarque :

Par transformation de Fourier et retour à l'espace des temps, la relation (41) impose une limite à la résolution temporelle δt du système de détection : $\delta t \geq 1/\Omega_R$. Il est donc impossible de mesurer un temps d'émission du photon avec une précision qui soit de l'ordre de la période de précession de Rabi.

γ . Photodétection à grande résolution temporelle

Nous étudions maintenant le cas opposé où les détecteurs ont une résolution temporelle meilleure que la période de la précession de Rabi. Ceci permet de déterminer de façon précise quand le photon a été émis, mais il n'est plus possible de distinguer les fréquences des trois composantes du triplet.

Nous avons vu plus haut (§ 1-e) que les processus élémentaires d'émission spontanée ont un temps de corrélation très court devant tous les autres temps du problème (à cause de la grande largeur spectrale $\Delta\omega$ du réservoir de modes vides). Une émission spontanée à partir de $\mathcal{E}(N)$ correspond donc à un processus de "saut quantique" très bref qui fait passer le système de l'état $|e, N-1\rangle$ de $\mathcal{E}(N)$ à l'état $|g, N-1\rangle$ de $\mathcal{E}(N-1)$. Une fois arrivé dans ce second état, l'atome ne peut pas émettre immédiatement un second photon, puisqu'aucune émission spontanée ne peut se produire à partir d'un état fondamental g . Il faut donc attendre un certain

temps pour que le couplage entre l'atome et le laser fasse passer le système de l'état $|g, N - 1\rangle$ à l'état $|e, N - 2\rangle$ auquel il est couplé, et à partir duquel un autre photon peut être émis spontanément. Le système va ensuite tomber dans l'état $|g, N - 2\rangle$, et le processus précédent reprend (avec une valeur de N diminuée d'une unité). Ce raisonnement permet de comprendre qu'il existe un phénomène de "dégrouperement temporel des photons" émis par un atome unique, puisqu'ils doivent être séparés d'un temps minimal de l'ordre de $1/\Omega_R$; ce dégroupement a déjà été décrit au § 3-b- γ du Complément B_{XX}.

4. Modifications du champ. Dispersion et absorption

Nous étudions maintenant les modifications subies par le champ électromagnétique sous l'effet de ses interactions avec l'atome.

4-a. Atome dans une cavité

L'interaction atome-champ ne perturbe pas seulement l'atome; les propriétés du champ sont également modifiées. Pour étudier ce problème, il est commode de considérer un atome placé dans une cavité réelle, supposée parfaite, c'est-à-dire dont les pertes peuvent être ignorées (les échelles de temps pour lesquelles elles se manifestent sont beaucoup plus longues que tous les autres temps pertinents de l'expérience). A la différence de ce que nous avons fait précédemment, nous gardons maintenant la dépendance en N des fréquences de Rabi Ω_N données par les équations (8) et (9), puisque le nombre de photons N a un sens physique dans la cavité (§ 1-d).

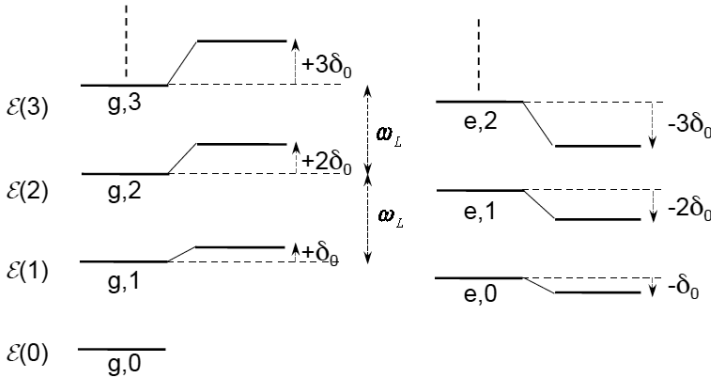


FIGURE 8 – Niveaux d'énergie du système atome + champ pour des faibles valeurs du nombre N de photons (en unités de fréquences : les énergies sont divisées par \hbar). Les états $|g, N\rangle$ et $|e, N - 1\rangle$ de $\mathcal{E}(N)$ subissent des déplacements opposés et proportionnels à N . L'état $|g, 0\rangle$ ne subit aucun déplacement.

La Figure 8 représente les premières multiplicités $\mathcal{E}(N)$ du système atome + champ pour des faibles valeurs du nombre N de photons, croissant à partir de $N = 0$. La multiplicité $\mathcal{E}(0)$ ne contient qu'un seul état, l'état $|g, 0\rangle$. La multiplicité

$\mathcal{E}(1)$ contient les deux états $|g, 1\rangle$ et $|e, 0\rangle$. La multiplicité $\mathcal{E}(2)$ contient les deux états $|g, 2\rangle$ et $|e, 1\rangle$, et ainsi de suite.

Nous supposons que le couplage est faible, de sorte que nous pouvons utiliser les résultats perturbatifs du § 2 pour les déplacements lumineux subis par les différents états non perturbés. L'état $|g, 0\rangle$ ne subit aucun déplacement car il n'est couplé à aucun autre état⁹. Les états $|g, 1\rangle$ et $|e, 0\rangle$ de $\mathcal{E}(1)$ subissent des déplacements opposés $+\delta_g$ et $-\delta_g$, respectivement, où δ_g est donné par l'équation (6); dans cette relation on remplace Ω_R par Ω_1 , puisque la valeur de la fréquence de Rabi pour $N = 1$ est, d'après (8), égale à Ω_1 . Si nous posons :

$$\delta_0 = \Omega_1^2 \frac{\delta}{4\delta^2 + \Gamma^2}, \quad (42)$$

les déplacements des états $|g, 1\rangle$ et $|e, 0\rangle$ sont respectivement égaux à $+\delta_0$ et $-\delta_0$. Les carrés des fréquences de Rabi Ω_N caractérisant le couplage atome champ dans les multiplicités $\mathcal{E}(N)$, croissent d'après (8), comme N ; en conséquence, les états $|g, 2\rangle$ et $|e, 1\rangle$ de $\mathcal{E}(2)$ subissent des déplacements respectivement égaux à $+2\delta_0$ et $-2\delta_0$. Plus généralement, les états $|g, N\rangle$ et $|e, N-1\rangle$ de $\mathcal{E}(N)$ subissent des déplacements respectivement égaux à $+N\delta_0$ et $-N\delta_0$.

Un raisonnement analogue peut être fait pour les élargissements radiatifs. Il permet de montrer que les largeurs radiatives des états $|g, N\rangle$ et $|e, N-1\rangle$ de $\mathcal{E}(N)$ sont respectivement égales¹⁰ à $+N\gamma_0$ et $\Gamma - N\gamma_0$, où γ_0 est donné, d'après (6) par :

$$\gamma_0 = \Omega_0^2 \frac{\Gamma}{4\delta^2 + \Gamma^2} \quad (43)$$

4-b. Déplacement de la fréquence du champ en présence de l'atome

Considérons la colonne de gauche de la Figure 8. L'écart entre les énergies perturbées des états $|g, 1\rangle$ et $|g, 0\rangle$ est égal à $\hbar(\omega_L + \delta_0)$; l'écart entre les énergies perturbées des états $|g, 2\rangle$ et $|g, 1\rangle$ est égal à $\hbar(\omega_L + 2\delta_0 - \delta_0) = \hbar(\omega_L + \delta_0)$, et ainsi de suite. Le fait que le déplacement radiatif des états $|g, N\rangle$ augmente linéairement avec N , comme $N\delta_0$, entraîne que les niveaux perturbés de la colonne de gauche de la Figure 8 demeurent équidistants lorsqu'on tient compte du couplage; la distance entre niveaux consécutifs passe simplement de $\hbar\omega_L$ à $\hbar(\omega_L + \delta_0)$. En d'autres termes, la présence d'un atome dans l'état g dans la cavité change la fréquence du champ en la faisant passer de ω_L à $\omega_L + \delta_0$. Comme les déplacements lumineux des états de la colonne de droite de la Figure 8 sont de signes opposés, un raisonnement analogue permet de montrer que la présence d'un atome dans l'état e dans la cavité fait passer la fréquence du champ de ω_L à $\omega_L - \delta_0$.

L'interaction atome-champ déplace donc la fréquence du champ dans la cavité d'une quantité qui change de signe suivant que l'atome est dans l'état interne g ou e . Supposons que cette interaction dure un temps T , ce qui se produit si un atome est envoyé dans la cavité et la traverse pendant ce temps. L'oscillation du champ va alors accumuler un déphasage ϕ par rapport à l'oscillation libre en l'absence d'atome; ce

9. Il existe bien un couplage entre l'état $|g, 0\rangle$ et l'état $|e, 1\rangle$, mais ce couplage est très fortement non résonnant; nous l'ignorons puisque, comme nous l'avons dit plus haut, nous faisons un calcul à l'ordre zéro en Ω_R/ω_L .

10. L'état $|g, 0\rangle$ ne subit aucun élargissement radiatif.

déphasage est égal à $\phi = +\delta_0 T$ si l'atome est dans l'état g , à $\phi = -\delta_0 T$ si l'atome est dans e .

Cette modification de la fréquence du champ est un effet analogue à celui décrit par la partie réelle de l'indice de réfraction. Un faisceau lumineux qui traverse un milieu atomique subit une modification de sa vitesse de propagation, sans que sa fréquence ne change. Dans une cavité, la longueur d'onde du champ ne peut changer puisqu'elle est déterminée par les conditions aux limites sur les parois de la cavité et est donc reliée aux dimensions de la cavité. Le déphasage par rapport à l'évolution libre ne peut plus s'accumuler dans l'espace, mais dans le temps, par une modification de la fréquence du champ. Quand on fait varier la fréquence ω_L du champ de part et d'autre de la fréquence atomique ω_0 , le changement de signe du déplacement lumineux δ_0 rappelle le changement de signe de la partie réelle de l'indice de réfraction au voisinage d'une résonance atomique¹¹.

4-c. Absorption du champ

Considérons un atome dans l'état fondamental g qui, à l'instant $t = 0$, se trouve en présence d'un champ dans un état cohérent quasi classique $|\alpha\rangle$ (Complément G_V) du mode ω_L . L'état du système total s'écrit :

$$|\psi(0)\rangle = |g\rangle \otimes |\alpha\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\alpha^N}{\sqrt{N!}} e^{-|\alpha|^2/2} |g, N\rangle. \quad (44)$$

L'évolution ultérieure en présence du couplage modifie les énergies des états $|g, N\rangle$ qui deviennent égales à :

$$\tilde{E}_N = N\hbar(\omega_L + \delta_0 - i\gamma_0/2). \quad (45)$$

et l'état du système à l'instant t est transformé en :

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\alpha^N}{\sqrt{N!}} e^{-|\alpha|^2/2} \exp[-iN(\omega_L + \delta_0 - i\gamma_0/2)t] |g, N\rangle \\ &\propto |g\rangle \otimes |\alpha \exp[-i(\omega_L + \delta_0 - i\gamma_0/2)t]\rangle. \end{aligned} \quad (46)$$

L'atome est toujours en présence d'un état cohérent quasi classique. Cependant, par rapport à l'évolution libre de cet état en l'absence de couplage, l'interaction atome-champ a introduit un déphasage $\delta_0 t$ (comme discuté plus haut) ainsi qu'une décroissance de l'amplitude en $e^{-\gamma_0 t/2}$, donc une atténuation de l'amplitude du champ. Ceci rappelle l'absorption du rayonnement décrite par la partie imaginaire de l'indice de réfraction.

On peut donc dire en conclusion de cette partie que le couplage atome-champ fait apparaître des déplacements lumineux et des élargissements radiatifs des niveaux de l'atome qui sont les pendants, pour ce dernier, des effets bien connus en optique de dispersion et d'absorption du champ.

Conclusion

Nous avons présenté dans ce complément une grande variété de situations pour lesquelles l'approche de l'atome habillé apporte une importante clarification,

11. Cet effet est parfois appelé "*dispersion anormale*."

tout en évitant des calculs compliqués. Le fait de considérer l'atome et le mode du champ avec lequel il interagit comme un système quantique décrit par un hamiltonien indépendant du temps permet d'introduire des véritables niveaux d'énergie du système global; on obtient ainsi un éclairage nouveau et général sur les processus d'absorption et d'émission induite de photons.

On peut par exemple comprendre aisément comment le couplage atome-photons modifie le diagramme d'énergie de l'atome habillé aux fortes intensités, et donc interpréter très simplement les nouvelles fréquences émises qui apparaissent alors dans le spectre de fluorescence. Comme le diagramme d'énergie de l'atome habillé est formé de multiplicités séparées d'une énergie égale à l'énergie d'un photon, l'émission spontanée d'un photon apparaît dans cette approche comme un saut quantique de l'atome habillé d'une multiplicité à la multiplicité inférieure la plus proche (cascade radiative). La fonction délai donnant la distribution des intervalles de temps séparant deux sauts quantiques successifs peut être calculée simplement dans cette approche et permet d'étudier les corrélations temporelles entre photons de fluorescence. Mentionnons enfin que la connaissance de cette fonction délai permet de simuler l'évolution temporelle d'un atome et d'obtenir des trajectoires quantiques individuelles qui peuvent éventuellement être ensuite moyennées pour obtenir l'évolution moyenne. Nous présenterons différentes applications expérimentales de la méthode de l'atome habillé dans le complément suivant.

Complément D_{XX}

Les déplacements lumineux : un outil pour manipuler les atomes et le champ

1	Forces dipolaires et pièges laser	585
2	Miroirs pour atomes	587
3	Réseaux optiques	588
4	Refroidissement sub-Doppler. Effet Sisyphe	589
	4-a Configuration laser avec polarisation variant dans l'espace	590
	4-b Transition atomique	591
	4-c Déplacements lumineux	591
	4-d Pompage optique	592
	4-e L'effet Sisyphe	592
5	Détection non destructive d'un photon	593

Les déplacements lumineux étudiés dans le § 2-b du Complément C_{XX} possèdent plusieurs propriétés importantes qui les rendent intéressants pour de nombreuses applications ; le but de ce complément est de les discuter brièvement.

Ces déplacements sont proportionnels à l'intensité laser de sorte que, si l'intensité laser est inhomogène spatialement, leur grandeur varie dans l'espace. On peut donc les utiliser pour créer des puits de potentiel (§ 1) permettant de piéger des atomes suffisamment froids (pièges laser), ou également des barrières de potentiel (§ 2) permettant de les réfléchir (miroirs pour atomes). Une situation particulièrement intéressante est celle d'un réseau périodique de puits de potentiel apparaissant aux nœuds ou aux ventres d'une onde laser stationnaire désaccordée de résonance (§ 3). La situation rappelle alors celle d'électrons piégés dans le potentiel périodique d'un réseau cristallin. Les réseaux d'atomes neutres peuvent permettre ainsi de simuler des problèmes de matière condensée.

Si le désaccord δ entre la fréquence du laser et la résonance atomique n'est pas trop grand et si plusieurs sous-niveaux Zeeman existent dans l'état fondamental, il peut y avoir coexistence entre effets non dissipatifs, comme les déplacements lumineux, et effets dissipatifs, comme le pompage optique entre sous-niveaux Zeeman. Nous montrons dans le § 4 comment des corrélations entre ces deux types d'effets peuvent donner naissance à des mécanismes nouveaux de refroidissement, comme le refroidissement Sisyphe, permettant de refroidir les atomes à des températures beaucoup plus basses que le refroidissement Doppler.

Enfin, nous montrons dans le § 5 comment les déplacements lumineux d'un atome traversant une cavité très désaccordée peuvent permettre, par des mesures effectuées sur l'atome à la sortie de la cavité, de déterminer le nombre de photons présents dans la cavité sans qu'aucun photon ne soit absorbé.

1. Forces dipolaires et pièges laser

Si l'intensité lumineuse varie dans l'espace, ce qui est le cas par exemple pour un faisceau laser focalisé ou une onde stationnaire, les déplacements lumineux varient

eux aussi dans l'espace. Lorsque le désaccord δ entre la fréquence laser et la fréquence atomique est suffisamment grand devant la largeur naturelle Γ du niveau excité, on peut négliger la dissipation liée à l'émission spontanée pendant les échelles de temps caractéristiques de l'expérience. Le déplacement lumineux $\hbar\delta_g(\mathbf{R})$ de l'état fondamental g dépend, comme l'intensité lumineuse, de la position \mathbf{R} du centre de masse de l'atome ; il peut alors être considéré comme une énergie potentielle $V(\mathbf{R}) = \hbar\delta_g(\mathbf{R})$ qui modifie le mouvement de l'atome. Le signe de ce potentiel est le même que celui du déplacement lumineux et dépend donc du signe du désaccord de fréquence δ .

Le potentiel $V(\mathbf{r})$ donne lieu à une force :

$$\mathbf{F}_{\text{dip}}(\mathbf{R}) = -\nabla_{\mathbf{R}}V(\mathbf{R}) \quad (1)$$

qui est appelée "force dipolaire", ou encore "force réactive" (§ 11.4 de [23]). Elle est différente des forces de pression de radiation étudiées dans le § 1-d du Complément A_{XIX}, qui sont dues à des échanges d'impulsion lors des absorptions de photons par l'atome, suivies d'émission spontanées. Les forces dipolaires ont été introduites ici comme résultant des variations spatiales des déplacements lumineux des niveaux de l'atome habillé. On peut également considérer qu'elles résultent de processus de redistribution de photons entre les différentes ondes planes qui constituent l'onde laser¹ : l'atome absorbe un photon dans une onde plane et le ré-émet de façon stimulée dans une autre onde plane ; ce processus fait varier son impulsion et donne donc naissance à une force.

Remarque :

Comme les déplacements lumineux, les forces dipolaires varient selon une courbe de dispersion en fonction du désaccord de fréquence δ entre la fréquence du laser et la fréquence atomique. De plus, les déplacements lumineux des deux niveaux habillés d'une multiplicité $\mathcal{E}(N)$ sont de signes opposés pour un désaccord δ donné ; le signe de la force dipolaire change donc d'un état habillé $|\Psi_+(N)\rangle$ à l'état associé $|\Psi_-(N)\rangle$. Si le désaccord δ n'est pas trop grand, et si des processus d'émission spontanée se produisent, la cascade radiative de l'atome habillé peut donc produire des changements de signe de la force dipolaire en faisant passer l'atome d'états $|\Psi_+(N)\rangle$ à $|\Psi_-(N)\rangle$ et réciproquement ; c'est l'origine des fluctuations des forces dipolaires.

Une application importante des forces dipolaires est la réalisation de pièges laser. Commençons par considérer le cas d'un faisceau laser désaccordé vers le rouge ($\omega_L < \omega_0$) et focalisé au point O. Le déplacement lumineux, nul à l'extérieur du faisceau laser, est négatif à l'intérieur du faisceau laser ; il croît en valeur absolue quand on s'approche du point de focalisation du faisceau, point où il atteint sa valeur maximale. Il en résulte donc un puits de potentiel dans lequel un atome neutre peut être piégé ; il l'est effectivement si son énergie cinétique, de l'ordre de $k_B T$ à un facteur près, est inférieure à la profondeur U_0 du puits de potentiel. C'est la raison pour laquelle ces pièges laser n'ont pu être réalisés que dans les années 80, une fois

1. Une simple onde plane n'a pas de gradient d'intensité, et n'exerce donc aucune force de gradient. Les forces dipolaires, dues à des gradients d'intensité, n'existent donc qu'en présence de plusieurs ondes planes de vecteurs d'onde différents.

que les techniques de refroidissement laser des atomes (Complément A_{XIX}, § 2) ont permis de ralentir les atomes à des températures de l'ordre du microkelvin [54].

Remarque :

Les forces de piégeage intervenant dans les pièges laser sont de l'ordre du produit d'un dipôle atomique par un gradient de champ laser. Elles sont donc beaucoup plus faibles que les forces exercées par un champ électrique statique sur une particule chargée. C'est la raison pour laquelle les pièges laser pour atomes neutres sont beaucoup moins profonds que les pièges pour électrons ou ions. Il existe cependant d'autres types de pièges pour atomes neutres utilisant d'autres mécanismes physiques (voir par exemple le § 2-c du Complément A_{XIX}, et le Chapitre 14 de la référence [23] où ils sont brièvement passés en revue).

2. Miroirs pour atomes

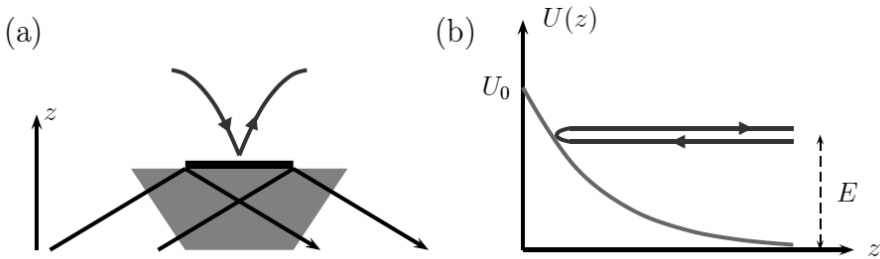


FIGURE 1 – (a) Un faisceau laser subit une réflexion totale sur la paroi interne d'un bloc de verre (partie grisée de la figure) dans lequel il se propage. A l'extérieur du bloc de verre apparaît une onde évanescente. (b) Si le laser est désaccordé vers le bleu ($\omega_L > \omega_0$), cette onde évanescente donne naissance à une barrière de potentiel de hauteur U_0 . Des atomes tombant sur cette barrière avec une énergie E inférieure à U_0 sont réfléchis par la barrière et rebroussent chemin.

Un laser désaccordé vers le bleu ($\omega_L > \omega_0$) donne naissance à des potentiels répulsifs. Supposons par exemple que l'onde se propage à l'intérieur d'un bloc de verre et subisse une réflexion totale sur une paroi du bloc de verre séparant le bloc de verre du vide (Figure 1-a). A l'extérieur du bloc de verre apparaît une onde évanescente décroissant exponentiellement avec la distance à la surface sur une distance de l'ordre de la longueur d'onde du laser. Cette onde évanescente donne naissance à une barrière de potentiel de hauteur U_0 sur laquelle des atomes arrivant avec une énergie $E < U_0$ sont réfléchis² (Figure 1-b). On réalise ainsi un miroir pour atomes neutres [55].

2. Des atomes tombant sur une surface solide ne seraient pas réfléchis, mais colleraient à la surface.

3. Réseaux optiques

Dans une onde laser stationnaire, l'intensité lumineuse est modulée dans l'espace avec une période $\lambda/2$: l'intensité est maximale aux ventres de l'onde stationnaire, nulle aux nœuds. Un réseau périodique de puits de potentiel est ainsi créé, situés aux ventres de l'onde si le désaccord est négatif ($\omega_L < \omega_0$), aux nœuds si l'est positif ($\omega_L > \omega_0$). La Figure 2 représente un réseau optique à deux dimensions obtenu avec deux ondes stationnaires le long de deux axes orthogonaux³.

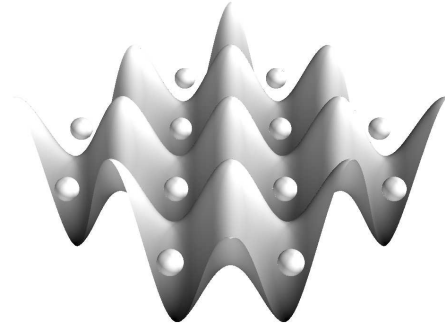


FIGURE 2 – Représentation schématique d'un réseau optique à deux dimensions : placé dans la somme de deux ondes laser stationnaires variant selon deux axes orthogonaux, l'atome est soumis à un potentiel périodique dans l'espace, représenté par la surface ondulée de la figure. Il apparaît alors un réseau périodique de puits de potentiel, situés aux ventres de l'onde stationnaire si $\omega_L < \omega_0$, aux nœuds si $\omega_L > \omega_0$. Les sphères au-dessus de la surface représentent les positions auxquelles les atomes peuvent être piégés.

L'étude des réseaux optiques est intéressante pour plusieurs raisons, en particulier parce que le mouvement d'un atome neutre dans un réseau optique rappelle beaucoup celui d'un électron dans un réseau cristallin. Les ordres de grandeur sont certes très différents, puisque la période spatiale d'un réseau optique est de l'ordre du micromètre, alors que la période d'un réseau cristallin est de l'ordre d'une fraction de nanomètre. Mais les réseaux optiques offrent un grand nombre de possibilités qui n'existent pas pour les réseaux cristallins :

- On peut aisément changer l'intensité des ondes laser formant l'onde stationnaire et modifier ainsi la profondeur des puits de potentiel ; ceci permet de contrôler l'importance de l'effet tunnel entre puits de potentiel voisins. Il a ainsi été possible d'explorer la transition entre un régime de puits profonds où les atomes sont localisés au fond des puits et un régime de puits peu profonds où leurs fonctions d'onde sont délocalisées sur l'ensemble du réseau [56].

3. Les fréquences ω_{L1} et ω_{L2} des deux ondes stationnaires sont en général suffisamment différentes pour que les termes d'interférence entre les deux ondes aient un effet négligeable sur le mouvement de l'atome ; on peut alors ajouter indépendamment les potentiels créés par les deux ondes. Ceci est réalisé si $|\omega_{L1} - \omega_{L2}|$ est grand devant toutes les fréquences caractéristiques du mouvement de l'atome, par exemple la fréquence de son mouvement de vibration au fond du puits ; les termes d'interférence oscillent alors trop vite pour avoir un effet appréciable.

- On peut couper brusquement les faisceaux laser de piégeage (ce qui serait évidemment impossible pour un réseau cristallin) et étudier le comportement des atomes ainsi libérés. L'étude de la vitesse d'expansion des nuages d'atomes donne des informations sur leur distribution de vitesses et donc sur leur température. L'étude de leur répartition spatiale et de l'apparition éventuelle d'une figure de diffraction permet de déterminer si les ondes de matière piégées dans les différents puits de potentiel du réseau sont cohérentes ou non.
- On peut prendre deux fréquences différentes ω_{L1} et ω_{L2} pour les deux ondes laser se propageant en sens opposés dans une onde laser stationnaire à une dimension. On réalise ainsi une onde laser stationnaire en mouvement, soit uniforme si $\omega_{L1} - \omega_{L2}$ est constant, soit accéléré si $\omega_{L1} - \omega_{L2}$ croît linéairement avec le temps. Dans ce dernier cas, l'atome ressent dans le référentiel au repos de l'onde stationnaire une force inertielle constante; son mouvement rappelle alors celui d'un électron soumis à un champ électrique statique s'ajoutant au potentiel périodique du réseau cristallin. On prévoit alors que le mouvement de la particule est oscillant. Ces oscillations sont appelées *oscillations de Bloch*; leur observation est rendue plus aisée dans un réseau optique par le fait que le temps de relaxation des atomes peut être beaucoup plus long que la période des oscillations [57].

Les atomes froids piégés dans un réseau optique apparaissent ainsi comme un système modèle permettant de "simuler" un certain nombre de situations de la physique des solides. Les études sur les atomes froids mettent en jeu des interactions entre atomes qui sont faibles, comparées aux interactions coulombiennes entre électrons. Elles peuvent de plus être contrôlées grâce à des effets de résonance apparaissant dans les collisions entre atomes.

L'exemple des réseaux optiques permet enfin de bien comprendre l'importance des déplacements lumineux. On pourrait en effet se demander s'il ne serait pas plus simple, pour déplacer les niveaux d'énergie atomiques, d'utiliser les effets Zeeman et Stark dans des champs magnétiques et électriques statiques, plutôt que les déplacements lumineux produits par une excitation à une fréquence optique non résonnante. L'avantage des déplacements lumineux est qu'ils permettent de réaliser des potentiels variant sur des distances très petites, de l'ordre d'une longueur d'onde optique, alors que ceci serait beaucoup plus difficile avec des champs statiques.

4. Refroidissement sub-Doppler. Effet Sisyphé

Dans le § 2-b du Complément A_{XIX}, nous avons décrit un mécanisme de refroidissement des atomes basé sur l'effet Doppler et appelé pour cette raison "refroidissement Doppler". Nous avons calculé les coefficients de friction et de diffusion associés à un tel mécanisme et montré que la température la plus basse T_D pouvant être atteinte par le refroidissement Doppler était de l'ordre de $\hbar\Gamma/k_B$, où Γ est la largeur naturelle du niveau excité des atomes et k_B la constante de Boltzmann. Or les premières mesures de températures, obtenues par refroidissement laser et effectuées par la méthode de temps de vol [58], ont montré que des températures nettement plus basses que T_D étaient obtenues; de plus, leurs variations avec le désaccord δ entre la fréquence des faisceaux laser et la fréquence atomique n'étaient pas conformes avec les prédictions de la théorie du refroidissement Doppler. Ceci montrait que d'autres

mécanismes de refroidissement des atomes existaient, et permettaient d’obtenir des températures plus basses que la limite Doppler T_D ; tout naturellement, ces mécanismes ont été qualifiés de “sub-Doppler”. Le but de ce paragraphe est de décrire l’un d’entre eux appelé “effet Sisyphé”.

La théorie du refroidissement laser Doppler exposée dans le § 2-b du Complément A_{XIX} ne tient pas compte de plusieurs caractéristiques importantes des expériences de refroidissement laser.

- Dans la plupart des expériences effectuées à 3 dimensions, la polarisation du champ laser ne peut pas être uniforme. On ne peut donc pas ignorer les variations spatiales de cette polarisation.
- Les atomes étudiés ont plusieurs sous-niveaux dans l’état inférieur g et l’état excité e . L’approximation d’un atome à deux niveaux du § 2-b du Complément A_{XIX} est donc insuffisante.
- L’existence de plusieurs sous-niveaux dans l’état inférieur g implique d’inclure les effets de pompage optique entre ces sous-niveaux, effets qui font apparaître des constantes de temps (temps de pompage) plus longues que la durée de vie $1/\Gamma$ de l’état excité.
- Comme le désaccord δ entre la fréquence des faisceaux laser et la fréquence atomique n’est pas nul, il faut prendre en compte les déplacements lumineux de l’état inférieur g , déplacements qui peuvent varier d’un sous-niveau à l’autre.

Avant de décrire l’effet Sisyphé, nous allons montrer comment il est possible de tenir compte de ces divers effets sur un exemple simple.

4-a. Configuration laser avec polarisation variant dans l’espace

Des configurations laser avec polarisation variant dans l’espace ne nécessitent pas forcément 3 paires de faisceaux laser se propageant en sens opposés le long des axes Ox , Oy et Oz . Elles existent aussi à une dimension, et sont alors plus simples à étudier, pourvu que les 2 ondes laser se propageant en sens opposés aient des polarisations différentes. Par exemple, la Figure 3 représente 2 ondes laser se propageant en sens opposés le long de l’axe Oz et ayant des polarisations linéaires orthogonales \mathbf{e}_x et \mathbf{e}_y . La polarisation du champ total est alternativement circulaire droite (σ_+ par rapport à l’axe de quantification Oz) et gauche (σ_-) dans des plans séparés d’une distance $\lambda/4$, linéaire à $\pm 45^\circ$ des axes Ox et Oy à mi-chemin de ces plans.

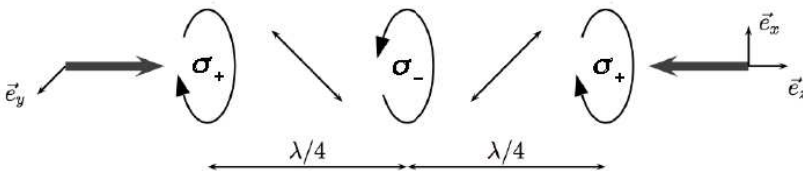


FIGURE 3 – Configuration laser formée par deux ondes laser se propageant en sens opposés le long de l’axe Oz et ayant des polarisations linéaires orthogonales \mathbf{e}_x et \mathbf{e}_y .

4-b. Transition atomique

Il arrive souvent que les expériences de refroidissement laser utilisent des transitions reliant un état inférieur g de moment cinétique J_g à un état excité e de moment cinétique $J_e = J_g + 1$. Nous prendrons ici le cas le plus simple possible $J_g = 1/2$, où l'état inférieur n'est pas dégénéré et ne contient que 2 sous-niveaux $g_{\pm 1/2}$. On a alors $J_e = 3/2$ et l'état excité contient 4 sous-niveaux $e_{\pm 1/2}$ et $e_{\pm 3/2}$.

4-c. Déplacements lumineux

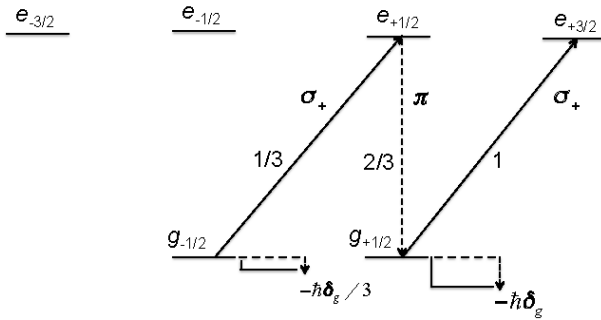


FIGURE 4 – Transition $1/2 \leftrightarrow 3/2$. Les flèches obliques montantes représentent les transitions excitées en un point où la polarisation du champ laser est σ_+ , la flèche verticale descendante la transition d'émission spontanée du sous-niveau $e_{+1/2}$, vers le sous-niveau $g_{+1/2}$. Les déplacements lumineux des états $g_{-1/2}$ et $g_{+1/2}$ sont notés $-\hbar\delta_g/3$ et $-\hbar\delta_g$. En un point où la polarisation du laser devient σ_- au lieu de σ_+ , par symétrie les déplacements des deux niveaux s'échangent entre eux.

Plaçons-nous tout d'abord en un point de l'espace où la polarisation du champ laser est σ_+ (par rapport à l'axe de quantification Oz). Nous avons vu dans le § 1-b du Complément C_{XIX} que les photons ayant une polarisation σ_+ (σ_-) ont un moment cinétique de spin $+\hbar$ ($-\hbar$) le long de l'axe Oz . La conservation du moment cinétique total lors du processus d'absorption d'un photon σ_+ (σ_-) où m_e et m_g sont les nombres quantiques magnétiques des 2 états reliés. La Figure 4 montre les 2 transitions $g_{-1/2} \leftrightarrow e_{+1/2}$ et $g_{+1/2} \leftrightarrow e_{+3/2}$ ($m_e - m_g = +1$) qui peuvent être excitées par le champ laser. Les chiffres $1/3$ et 1 indiqués près de ces 2 transitions sont les carrés des coefficients de Clebsch-Gordan (Complément B_X) de ces 2 transitions; ils indiquent que la transition $g_{+1/2} \rightarrow e_{+3/2}$ est 3 fois plus intense que la transition $g_{-1/2} \leftrightarrow e_{+1/2}$. Comme le désaccord δ entre la fréquence des faisceaux laser et la fréquence atomique est négatif dans une expérience de refroidissement laser, le déplacement lumineux des 2 états $g_{\pm 1/2}$ est négatif; il est 3 fois plus grand en module pour l'état $g_{+1/2}$ que pour l'état $g_{-1/2}$. Ces déplacements sont notés sur la figure $-\hbar\delta_g$ et $-\hbar\delta_g/3$, où δ_g est positif.

En un point de l'espace où la polarisation est σ_- , les résultats précédents sont inversés. C'est la transition $g_{-1/2} \leftrightarrow e_{-3/2}$ qui est 3 fois plus intense que la transition $g_{+1/2} \leftrightarrow e_{-1/2}$, conduisant à des déplacements lumineux égaux à $-\hbar\delta_g$ et $-\hbar\delta_g/3$

pour les états $g_{-1/2}$ et $g_{+1/2}$, respectivement.

Enfin, en un point où la polarisation est linéaire, les 2 déplacements lumineux sont identiques par symétrie et proportionnels au carré du coefficient de Clebsch-Gordan $2/3$ indiqué pour la transition $g_{+1/2} \leftrightarrow e_{+1/2}$ sur la figure. Ils sont donc égaux tous deux à $-2\hbar\delta_g/3$.

Ainsi, quand on se déplace le long de l'axe z , les positions des 2 sous-niveaux Zeeman $g_{-1/2}$ et $g_{+1/2}$ oscillent en opposition de phase entre les valeurs $-\hbar\delta_g$ et $-\hbar\delta_g/3$ (si l'on prend égale à zéro l'énergie de l'état fondamental non perturbé).

4-d. Pompage optique

Plaçons nous en un point où la polarisation du champ laser est σ_+ et considérons un atome dans l'état $g_{+1/2}$. Il peut absorber un photon σ_+ et passer dans l'état $e_{+3/2}$. À partir de cet état, il ne peut retomber par émission spontanée que dans le même état $g_{+1/2}$; le pompage optique (§ 1-b du Complément C_{XIX}) ne peut dans ce cas produire aucun changement de population. En revanche, si l'atome est initialement dans l'état $g_{-1/2}$ et s'il absorbe un photon σ_+ qui le fait passer dans l'état $e_{+1/2}$, il peut ensuite retomber par émission spontanée dans l'état $g_{+1/2}$; un pompage optique peut alors se produire depuis le sous-niveau le moins déplacé $g_{-1/2}$ vers le sous-niveau le plus déplacé $g_{+1/2}$. La situation est la même en un point où la polarisation du champ laser est σ_- . Le pompage optique ne peut se produire que du sous-niveau le moins déplacé $g_{+1/2}$ vers le sous-niveau le plus déplacé $g_{-1/2}$. Enfin, en un point où la polarisation du champ laser est linéaire, l'égalité des coefficients de Clebsch-Gordan des transitions $g_{-1/2} \leftrightarrow e_{-1/2}$ et $g_{+1/2} \leftrightarrow e_{+1/2}$ et des transitions $e_{-1/2} \leftrightarrow g_{+1/2}$ et $e_{+1/2} \leftrightarrow g_{-1/2}$ entraîne que les populations des 2 sous-niveaux $g_{-1/2}$ et $g_{+1/2}$ ne sont pas changées par le pompage optique. En conclusion, le pompage optique ne se produit que du sous-niveau le moins déplacé vers le sous-niveau le plus déplacé, avec une probabilité maximale aux points où la polarisation du champ laser est circulaire.

4-e. L'effet Sisyphe

Montrons maintenant comment les corrélations entre déplacements lumineux et pompage optique étudiées dans les deux paragraphes précédents permettent de réduire l'énergie cinétique de l'atome, et donc de le refroidir.

La Figure 5 montre, pour un atome se déplaçant le long de l'axe Oz , les énergies des 2 sous-niveaux $g_{-1/2}$ et $g_{+1/2}$ déplacés par la lumière. Supposons que l'atome parte au bas d'une vallée de potentiel, en un point où la polarisation du champ laser est σ_+ , dans l'état le plus déplacé $g_{+1/2}$. En se déplaçant vers la droite, il gravit une colline de potentiel, de sorte que son énergie cinétique décroît. Si le temps de pompage optique est suffisamment long, il peut atteindre le sommet de la colline où la polarisation du champ laser est σ_- ; il a alors une probabilité élevée de subir un cycle de pompage optique qui le transfère dans le sous-niveau le plus déplacé, qui est en ce point le sous-niveau $g_{-1/2}$. Le cycle précédent peut se répéter, faisant à chaque fois diminuer l'énergie cinétique de l'atome d'une quantité qui est de l'ordre de l'écart maximal entre les deux sous-niveaux de la Figure 5, égal à $2\hbar\delta_g/3$. La situation de l'atome rappelle celle du héros de la mythologie grecque, Sisyphe, condamné à gravir sans cesse une colline de potentiel et replacé au bas de la colline

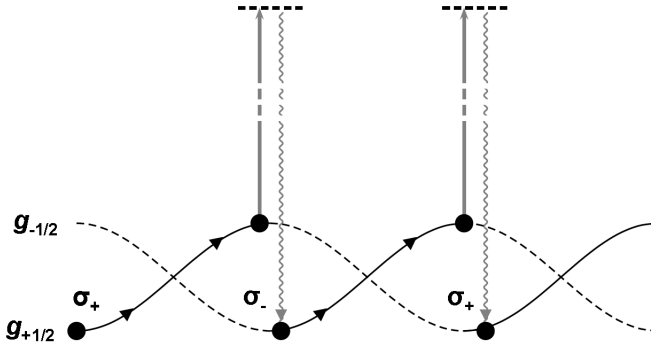


FIGURE 5 – Principe du refroidissement Sisyphé : un atome dans l'état $g_{+1/2}$ se déplaçant à partir d'un point où la polarisation du champ laser est σ_+ doit gravir une colline de potentiel de hauteur $2\hbar\delta_g/3$, ce qui diminue son énergie cinétique. Quand il atteint le sommet de la colline où la polarisation du champ laser est σ_- , il a alors une probabilité élevée de retomber par émission spontanée dans l'état $g_{-1/2}$. Lorsque le cycle se répète, l'atome ne cesse donc de gravir des collines de potentiel, comme le héros de la mythologie grecque. Son énergie cinétique diminue donc constamment.

à chaque fois qu'il avait atteint le sommet, d'où le nom d'effet Sisyphé donné à ce mécanisme.

Un argument simple permet d'évaluer la température qu'un tel mécanisme permet d'atteindre. L'énergie cinétique de l'atome décroît à chaque cycle Sisyphé, jusqu'à ce qu'elle soit si faible que l'atome reste piégé au fonds d'un puits de potentiel. Son énergie alors est de l'ordre de $\hbar\delta_g$. On s'attend donc à ce que la température limite T_S que l'on peut atteindre par le refroidissement Sisyphé soit donnée par $T_S \simeq \hbar\delta_g/k_B$. Dans les expériences de refroidissement laser, les intensités laser sont généralement faibles et les transitions atomiques ne sont pas saturées, de sorte que $\hbar\delta_g \ll \hbar\Gamma$ et par suite $T_S \ll T_D$. On comprend ainsi pourquoi les températures mesurées peuvent être deux ordres de grandeur plus basses que la température Doppler et atteindre des valeurs de l'ordre de $10^{-6}K$, ouvrant la voie à de nombreuses applications.

Toutes ces prédictions qualitatives sont confirmées par des modèles plus quantitatifs (voir ([59]) et ([60])). Des expériences ont pu aussi confirmer ces prédictions théoriques, en particulier celles concernant la dépendance de T_S en fonction des divers paramètres expérimentaux, comme l'intensité et le désaccord des lasers [61].

5. Détection non destructive d'un photon

Considérons maintenant une expérience où les atomes d'un jet traversent l'un après l'autre une cavité contenant du rayonnement, dont l'état quantique est un état de Fock ; le nombre de photons dans le mode de la cavité est donc fixé, par exemple 0 (vide de rayonnement) ou 1 (un photon). Les atomes sont envoyés dans

une superposition cohérente des deux états g et e :

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + |e\rangle) \quad (2)$$

Du fait de l'interaction entre chaque atome et les photons, et donc des déplacements lumineux, les deux états atomiques acquièrent des déphasages différents ; mais, si le désaccord δ entre la fréquence du laser et la fréquence atomique est suffisamment grand, aucun photon n'est émis ou absorbé. Ainsi, lorsqu'un atome sort de la cavité, l'état du rayonnement est le même état de Fock qu'initialement, mais l'état de l'atome est modifié par ce facteur de phase. Cet état est donc (à un facteur global de phase sans conséquence physique près) :

$$|\psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + e^{-i\phi}|e\rangle) \quad (3)$$

La phase ϕ n'est autre que l'intégrale sur le temps de la différence d'énergie (divisée par \hbar) entre les niveaux de l'atome habillé mis en jeu lors du passage de l'atome dans la cavité. Elle est donc donnée par le diagramme d'énergie de l'atome habillé.

La Figure 8 du Complément C_{XX} montre que l'écart entre les états $|e, 0\rangle$ et $|g, 0\rangle$ est réduit de $\hbar\omega_L$ à $\hbar(\omega_L - \delta_0)$ par les déplacements lumineux. Si la cavité est vide de photons ($N = 0$), lorsque l'atome sort de la cavité la cohérence entre les états e et g a subi un déphasage :

$$\phi_0 = - \int \delta_0(t') dt' \quad (4)$$

où $\delta_0(t')$ est obtenu en remplaçant dans (42) la fréquence de Rabi Ω_1 par une fonction du temps rendant compte du déplacement de l'atome dans le mode de la cavité, et du fait qu'il est donc soumis à une intensité lumineuse dépendant du temps ; rappelons que nous avons supposé que le désaccord δ entre la fréquence atomique et la fréquence laser est suffisamment grand pour qu'aucune absorption réelle de photons par l'atome ne puisse se produire⁴. Si maintenant un photon se trouve dans la cavité ($N = 1$), on voit sur la Figure 8 que l'écart entre les états $|e, 1\rangle$ et $|g, 1\rangle$ est réduit par les déplacements lumineux de $\hbar(\omega_L - 2\delta_0 - \delta_0)$, soit $\hbar(\omega_L - 3\delta_0)$. Le déphasage subi par la cohérence entre les états e et g lorsque l'atome sort de la cavité est donc maintenant le triple du précédent obtenu en (4). En conséquence, l'atome qui traverse la cavité dans une superposition des deux états g et e garde dans la phase de sa superposition cohérente une trace de la valeur du nombre de photons dans la cavité ; ceci se produit sans qu'il ait absorbé aucun photon (car le désaccord δ est trop grand). En résumé, si $N = 0$, l'état de l'atome à la sortie de la cavité est :

$$|\psi_f(N = 0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + e^{-i\phi_0}|e\rangle) \quad (5)$$

4. Nous supposons également que la variation du champ ressenti par l'atome au cours de sa traversée de la cavité est suffisamment lente pour que des transitions non adiabatiques de e vers g , ou de g vers e , soient très peu probables. Nous supposons de plus que la largeur naturelle Γ de l'état excité e et le temps T de traversée de la cavité par l'atome sont suffisamment petits pour que $\Gamma T \ll 1$, ce qui signifie que l'émission spontanée à partir de e n'a pas le temps de se produire pendant cette traversée.

alors que, si $N = 1$, il sort dans l'état :

$$|\psi_f(N = 1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + e^{-i\phi_1}|e\rangle) \quad (6)$$

avec $\phi_1 = 3\phi_0$.

Comment exploiter cette trace laissée sur l'atome par le photon éventuellement présent dans la cavité, afin de mesurer si elle contient un ou zéro photon ? Le temps de traversée de la cavité peut être ajusté en réglant la vitesse de l'atome. Supposons que ce temps soit réglé de façon que $\phi_0 - \phi_1 = \pi$; les deux états (5) et (6) sont alors orthogonaux. Appliquons à l'atome sorti de la cavité une impulsion laser $\pi/2$ dont les caractéristiques sont ajustées de façon que l'impulsion transforme $|\psi_f(N = 0)\rangle$ en $|g\rangle$. Cette même impulsion laser transforme $|\psi_f(N = 1)\rangle$ en l'état orthogonal à $|g\rangle$, c'est-à-dire en $|e\rangle$. Ainsi, la mesure de l'état de l'atome après cette impulsion laser $\pi/2$ permet de conclure que $N = 0$ si l'atome est trouvé dans g , et que $N = 1$ si l'atome est trouvé dans e . La mesure peut être répétée plusieurs fois en envoyant des atomes les uns après les autres dans la cavité, et en leur appliquant la même procédure ; on obtient ainsi à plusieurs reprises la même valeur de N , ce qui permet de vérifier que le nombre de photons n'a pas changé pendant la durée de ces mesures. A la différence de la photo-ionisation où le photon est absorbé pour donner naissance à un photo-électron (Complément A_{XX}), cette méthode est non destructive : la présence du photon est détectée sans qu'il ne soit absorbé. La réalisation de cette expérience, qui a été généralisée au cas où le nombre de photons est supérieur à l'unité, est décrite plus en détail dans la référence [62].

Conclusion

Pendant longtemps, les déplacements lumineux ont été considérés comme un phénomène physique intéressant mais sans application particulière, voire comme une perturbation gênante pour la spectroscopie de haute résolution : ils modifient en effet les fréquences des transitions atomiques que l'on désire mesurer avec la plus grande précision possible. Ces modifications doivent donc être prises en compte pour extraire des mesures les fréquences non perturbées des transitions atomiques ; le plus souvent, il faut alors faire plusieurs mesures pour différentes valeurs de l'intensité lumineuse afin d'extrapoler les résultats à intensité lumineuse nulle.

Ce complément illustre bien à quel point la situation a changé, et la grande variété des méthodes expérimentales basées sur l'utilisation des déplacements lumineux des niveaux d'énergie atomiques, avec de multiples applications. Ces méthodes ont été mises au point plus de 20 ans après que les déplacements aient été prédits théoriquement et mis en évidence expérimentalement ; ceci illustre également l'impact pratique à long terme que peuvent avoir des découvertes de nature fondamentale. Elles permettent, soit d'agir à la fois sur les variables internes et externes des atomes, soit de se servir des atomes comme d'une sonde très sensible et non destructrice des propriétés d'un champ composé de quelques photons seulement. Il en découle par exemple la possibilité de piéger des atomes dans une onde laser stationnaire, ou d'obtenir des réseaux périodiques d'atomes neutres piégés dans cette onde. Cela a également conduit à des méthodes de refroidissement laser, qui ont permis d'atteindre des températures totalement inaccessibles auparavant dans des

gaz atomiques, des millions de fois plus basses que les températures les plus faibles que l'on peut trouver dans l'espace interstellaire ou intergalactique de l'Univers.

Complément E_{XX}

Détection de paquets d'ondes à un ou deux photons, interférences

1	Paquets d'ondes à un photon, probabilité de photo-détection	599
1-a	Photo-ionisation avec un détecteur à large bande spectrale	599
1-b	Amplitude de probabilité de détection	600
1-c	Variations temporelles du signal	601
2	Signaux d'interférence à un ou deux photons	602
2-a	Comment calculer les interférences de photons?	602
2-b	Signal d'interférence apparaissant sur un paquet d'ondes à un photon dans deux modes	603
2-c	Signaux d'interférence apparaissant sur un produit de deux paquets d'ondes à un photon	605
3	Amplitude d'absorption d'un photon par un atome . .	608
3-a	Calcul de l'amplitude	608
3-b	Propriétés de l'amplitude	609
4	Diffusion d'un paquet d'ondes	610
4-a	Amplitude d'absorption par l'atome B du photon diffusé par l'atome A	610
4-b	Paquet d'ondes diffusé par l'atome A	612
5	Exemple de paquet d'ondes à deux photons intriqués .	615
5-a	Conversion paramétrique	615
5-b	Corrélations temporelles entre les deux photons obtenus par conversion paramétrique	618

Introduction

Dans le Chapitre XX, nous avons pris pour états initial et final du système atome + photon des états d'énergies bien définies en l'absence d'interaction ; avant interaction, de tels états n'évoluent pas dans le temps, de sorte que le photon ne subit aucune propagation dans l'espace. Par exemple, dans le processus de diffusion d'un photon par un atome, l'état initial du rayonnement que nous avons choisi est un photon d'impulsion $\hbar\mathbf{k}_i$ et d'énergie $\hbar\omega_i = \hbar c k_i$ qui s'étend dans tout l'espace ; de même, l'état final est un photon d'impulsion $\hbar\mathbf{k}_f$ et d'énergie $\hbar\omega_f = \hbar c k_f$. L'interaction a été "branchée" à un instant t_i , ce qui permet de calculer l'amplitude de probabilité pour que le système atome + photon passe d'un état à l'autre entre t_i et t_f . Il est cependant clair que cette approche reste phénoménologique : en réalité, l'opérateur d'interaction reste constant, mais n'intervient pour modifier le vecteur d'état que lorsque le rayonnement passe sur l'atome. Une description plus réaliste du processus devrait donc faire intervenir la propagation d'un paquet d'ondes, où

le rayonnement incident est décrit par un paquet d'ondes, initialement très éloigné de l'atome, mais qui arrive sur lui ; leur interaction donne ensuite naissance à un paquet d'ondes diffusé qui s'éloigne à l'infini, tandis que le paquet d'ondes incident (modifié par l'interaction) continue également son chemin.

L'introduction d'un paquet d'ondes pour un photon ne peut cependant pas se faire par la méthode habituelle utilisée pour une particule de masse non nulle. Comme nous l'avons en effet noté à la fin du § B-2 du Chapitre XIX, le photon n'a pas d'opérateur position. Il n'est donc pas possible d'obtenir une fonction d'onde spatiale en projetant le vecteur d'état sur les vecteurs propres de cet opérateur, puis de calculer le module au carré de cette fonction d'onde pour obtenir la probabilité de trouver le photon dans telle ou telle région de l'espace. On pourrait alors songer à obtenir une localisation du photon en s'intéressant aux variations spatiales des champs électrique et magnétique. Mais, si l'on s'intéresse à des états du rayonnement à un, deux, etc. photons, la valeur moyenne de ces champs en tout point de l'espace est nulle (elle est la somme de valeurs moyennes nulles d'opérateurs de création et d'annihilation dans chacun des modes). Pour un photon unique, cette valeur moyenne n'est donc pas directement utilisable pour la construction d'un paquet d'ondes localisé dans l'espace. C'est pourquoi nous allons adopter une méthode différente pour suivre la trajectoire d'un photon : nous supposons qu'il interagit avec des détecteurs matériels, eux bien localisés dans l'espace, et nous reconstruirons sa trajectoire à partir des détections enregistrées par ces appareils. Ceci nous permettra d'introduire simplement une amplitude de détection du photon en un point donné (par photo-ionisation) qui présente des analogies étroites avec la fonction d'onde spatiale d'une particule massive en mécanique quantique non relativiste.

Dans le § 1, nous exposons l'idée générale de cette méthode ; nous introduisons une fonction $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ qui permet d'attribuer une localisation spatiale à un photon unique à partir de sa probabilité d'absorption par un détecteur à large bande spectrale. On peut alors parler de paquets d'ondes, et ceci même quand la moyenne du champ électrique reste nulle dans tout l'espace. On peut également introduire dans les calculs perturbatifs des états initial et final du rayonnement qui sont des paquets d'ondes, donc décrits par des superpositions linéaires d'états de photons d'impulsions et d'énergies différentes.

Au § 2, nous montrons comment l'amplitude de détection $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ permet d'étudier les phénomènes d'interférences lumineuses à un ou deux photons. Ces phénomènes s'interprètent alors en termes d'interférences entre amplitudes de transition associées à des chemins différents, chaque chemin conduisant le champ quantique d'un état initial donné au même état final. Après une discussion générale des signaux d'interférence au § 2-a, nous examinons au § 2-b les interférences à un photon se trouvant simultanément dans deux modes du champ. Nous passons ensuite aux interférences à deux photons dans le cas simple où le système est décrit par un produit de deux paquets d'ondes à un photon (§ 2-c).

Dans le § 3, nous remplaçons le détecteur à large bande par un atome possédant des niveaux discrets. Sans avoir à faire l'approximation peu physique d'un branchement soudain de couplage entre atome et rayonnement, nous retrouvons ainsi un certain nombre de résultats du Chapitre XX ; l'étude de l'aspect temporel du phénomène d'absorption devient alors possible. Au § 4, nous étendons la méthode à l'étude de la diffusion de photons par un atome. A nouveau, nous verrons que l'on peut ainsi retrouver les résultats du Chapitre XX, mais enrichis d'un certain nombre

de précisions concernant les aspects temporels du processus physique.

Enfin, au § 5, nous considérons de “véritables paquets d’ondes à deux photons”, des paquets d’ondes intriqués. La conversion paramétrique fournit un exemple d’une situation conduisant à des corrélations temporelles très fortes entre deux photons intriqués, corrélations qui seraient impossibles à comprendre dans le cadre d’un traitement classique du rayonnement. Dans tout ce complément, nous nous limitons à des paquets d’ondes à un photon ou deux photons, mais les calculs pourraient être étendus à des paquets d’ondes contenant un plus grand nombre de photons¹.

1. Paquets d’ondes à un photon, probabilité de photo-détection

Un paquet d’ondes à un photon est décrit par un état $|\psi\rangle$ où le nombre de photons est exactement égal à l’unité (état propre de l’opérateur nombre de photons de valeur propre 1). On construit ce paquet d’ondes² comme une superposition linéaire d’états d’impulsions $\hbar\mathbf{k}$ différentes, qui n’est pas stationnaire (ce n’est pas un état propre de l’énergie) :

$$|\psi\rangle = \int d^3k c(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle = \int d^3k c(\mathbf{k}) |\mathbf{k}\rangle \quad (1)$$

L’état $|\psi\rangle$ est du type considéré au § B-3-c du Chapitre XIX, un ket propre de l’opérateur \hat{N} (nombre total de photons) de valeur propre unité; il est supposé normé :

$$\int d^3k |c(\mathbf{k})|^2 = 1, \quad (2)$$

ce qui permet d’interpréter $|c(\mathbf{k})|^2$ comme la densité de probabilité pour que l’impulsion du photon soit égale à $\hbar\mathbf{k}$.

1-a. Photo-ionisation avec un détecteur à large bande spectrale

Supposons que l’on place un photo-détecteur au point \mathbf{r} dans le champ de rayonnement décrit par l’état (1). Selon la relation (26) du Complément B_{XX}, la probabilité $W_I(\mathbf{r}, t) dt$ d’observer l’émission d’un photo-électron entre les instants t et $t + dt$ est donnée (à l’ordre le plus bas en interaction) par :

$$W_I(\mathbf{r}, t) = s \langle \psi | E^{(-)}(\mathbf{r}, t) E^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle \quad (3)$$

où s est une constante qui dépend de la sensibilité du photo-détecteur; $E^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ et $E^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ sont les composantes de fréquence négative et positive de l’opérateur champ électrique qui apparaît dans le développement (A-7) du Chapitre XIX du champ électrique en ondes planes :

$$E^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \left[E^{(-)}(\mathbf{r}, t) \right]^\dagger = i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0}} a(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_k t)} \quad (4)$$

1. Ou même un nombre indéterminé, comme dans un état cohérent.

2. Pour simplifier, nous ignorons dans ce complément les degrés de liberté de polarisation du rayonnement, qui ne jouent pas un rôle essentiel dans les effets que nous décrivons. Ceci revient à supposer que tous les vecteurs \mathbf{k} apparaissant dans (1) ont des directions très voisines et qu’ils sont tous associés à la même polarisation $\boldsymbol{\epsilon}$.

avec :

$$\omega_k = c \times |\mathbf{k}| = c \times k \quad (5)$$

où c est la vitesse de la lumière. Rappelons que l'expression (3) est établie en représentation d'interaction, où le vecteur d'état $|\psi\rangle$ n'évolue que sous l'effet de l'interaction entre atome et rayonnement ; les opérateurs évoluent librement (sous le seul effet des hamiltoniens propres à l'atome et du rayonnement, c'est-à-dire sans interaction mutuelle). Cependant, comme nous effectuons un calcul à l'ordre le plus bas en interaction, nous pouvons considérer dans (3) que $|\psi\rangle$ est simplement constant. L'opérateur d'annihilation $E^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ de (3) agissant sur l'état à un photon $|\psi\rangle$ donne le vide, de sorte que (3) peut également s'écrire :

$$W_I(\mathbf{r}, t) = s \langle \psi | E^{(-)}(\mathbf{r}, t) | 0 \rangle \langle 0 | E^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle = s | \langle 0 | E^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle |^2 \quad (6)$$

soit :

$$W_I(\mathbf{r}, t) = s \left| \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0}} c(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_k t)} \right|^2 \quad (7)$$

Pour une particule matérielle de masse m , la probabilité de la trouver en un point \mathbf{r} à l'instant t serait donnée par le module au carré $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ de sa fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}, t)$, elle-même transformée de Fourier de l'amplitude de probabilité $g(\mathbf{k})$ de trouver la valeur $\hbar\mathbf{k}$ dans une mesure de l'impulsion de la particule. Si cette dernière est libre, l'amplitude de probabilité $g(\mathbf{k})$ varie en fonction du temps en $e^{-i\omega_k t}$. L'égalité (7) rappelle donc l'expression de cette probabilité pour une particule massive libre ; cependant, par suite du facteur $\sqrt{\omega_k}$ en \sqrt{k} contenu dans l'intégrale de (7) qui multiplie $c(\mathbf{k})$, $W_I(\mathbf{r}, t)$ n'est pas proportionnel (à un instant donné t) au carré du module de la transformée de Fourier spatiale de $c(\mathbf{k}, t) = c(\mathbf{k})e^{-i\omega_k t}$. Ainsi, si l'on se restreint à des états à un photon, la fonction $c(\mathbf{k})$ qui apparaît dans (1) peut certes être considérée comme une fonction d'onde dans l'espace des impulsions, puisque $|c(\mathbf{k})|^2$ est une densité de probabilité pour l'impulsion du photon ; mais la probabilité de détecter un photon au point \mathbf{r} et à un instant t avec un photo-détecteur n'est pas le carré du module de la transformée de Fourier de cette "fonction d'onde dans l'espace des impulsions" $c(\mathbf{k})e^{-i\omega_k t}$. Nous retrouvons ainsi que, pour un photon, il n'est pas possible d'introduire une fonction d'onde spatiale qui serait l'exact équivalent de celle d'une particule de masse non nulle.

1-b. Amplitude de probabilité de détection

La fonction dont le module au carré apparaît au second membre de (6) :

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \langle 0 | E^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle \quad (8)$$

joue un rôle important dans tous les calculs qui suivent ; elle a les dimensions d'un champ électrique. Pour le paquet d'ondes écrit en (1), elle s'écrit :

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0}} c(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_k t)} \quad (9)$$

Ce n'est cependant pas la valeur moyenne dans l'état $|\psi\rangle$ de l'opérateur $E^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ écrit en (4), puisque cette valeur moyenne est nulle. Comme nous l'avons déjà souligné, ce n'est donc pas une fonction d'onde du photon dans l'espace des positions; c'est une amplitude de probabilité de détection (et non de présence) du photon au point \mathbf{r} et à l'instant t . Quand nous parlerons dans ce complément de paquet d'ondes spatio-temporel associé au photon dans l'état (1), c'est à chaque fois de l'amplitude (8) qu'il s'agira.

Toutefois, dans le cas particulier où la fonction $c(\mathbf{k})$ est bien centrée dans l'espace des impulsions autour d'une valeur k_m avec une dispersion Δk très petite devant k_m , on peut négliger dans (7) les variations de \sqrt{k} avec k et remplacer \sqrt{k} par $\sqrt{k_m}$; ceci fait alors apparaître la transformée de Fourier spatiale de $c(\mathbf{k})e^{-i\omega_k t}$. C'est une approximation que nous ferons souvent dans la suite.

Remarques :

(i) Nous avons ignoré dans ce qui précède la polarisation du rayonnement, supposant que toutes les ondes planes qui interviennent dans (1) sont associées au même vecteur polarisation $\boldsymbol{\varepsilon}$. Lorsque ce n'est pas le cas, l'amplitude de détection devient alors une fonction vectorielle à trois composantes. Sa composante le long d'un axe quelconque donne l'amplitude de probabilité de détection par un photodétecteur précédé d'un analyseur de polarisation, ne laissant passer que la composante polarisée linéairement le long de cet axe. L'amplitude de détection vectorielle est semblable à la fonction d'onde d'une particule de spin 1, qui a également trois composantes.

(ii) Dans ce complément, nous étudierons les paquets d'ondes contenant un nombre bien défini de photons, 1 ou 2, ce qui permet de généraliser directement les calculs du Chapitre XX. On peut cependant former des paquets d'ondes de nombreuses façons, sans fixer exactement le nombre de photons. Il arrive par exemple souvent qu'on cherche à reproduire un champ classique pour lequel chaque mode \mathbf{k} du champ possède une certaine amplitude $\alpha(\mathbf{k})$; il est alors naturel d'utiliser un état où chaque mode quantique est placé dans un état cohérent de valeur propre $\alpha(\mathbf{k})$. Le nombre de photons n'est alors fixé qu'en valeur moyenne.

1-c. Variations temporelles du signal

Si le photo-détecteur est placé en $\mathbf{r} = 0$, le signal qu'il fournit est, d'après (7), donné par :

$$W_I(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t) \propto \left| \int d^3k \sqrt{k} c(\mathbf{k}) e^{-ickt} \right|^2 \tag{10}$$

Ce signal est donc proportionnel au carré du module de la transformée de Fourier de $\sqrt{k} c(\mathbf{k})$. Nous supposons que $c(k)$ est une fonction réelle et positive de k , et que $|c(k)|^2$ est une fonction de k centrée en $k = k_m$ et de largeur Δk . Si la largeur Δk du paquet d'ondes est très petite devant le nombre d'ondes moyen k_m , on peut alors remplacer \sqrt{k} par $\sqrt{k_m}$, et le signal devient proportionnel au carré du module de la transformée de Fourier de $c(\mathbf{k})$. Au temps $t = 0$, puisque nous avons supposé les $c(k)$ positifs, toutes les ondes qui composent le paquet d'ondes sont en phase et le signal observé sur le photo-détecteur est maximal; il est nul en $t = \pm\infty$, et ne prend de valeurs appréciables que dans un intervalle de temps $\Delta t \simeq 1/c\Delta k$ autour de $t = 0$. Ce signal décrit en quelque sorte le défilement du paquet d'ondes sur la position du détecteur.

Pour étudier la probabilité de détection en un point $\mathbf{r} \neq \mathbf{0}$, il suffit de remplacer dans l'intégrale de (10) e^{-ickt} par $e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-kct)}$. Supposons par exemple que le paquet d'ondes soit unidimensionnel, avec tous les vecteurs d'onde \mathbf{k} parallèles à l'axe Oz (on a $k_x = k_y = 0$); l'exponentielle devient alors $e^{-ik(z-ct)}$. Les phénomènes observés en un point de l'espace de coordonnée $z \neq 0$ se déduisent donc de ceux observés en $z = 0$ par un simple décalage dans le temps de z/c : le paquet d'ondes se déplace dans la direction Oz à la vitesse c et sans déformation.

2. Signaux d'interférence à un ou deux photons

Examinons maintenant ce qui se produit dans des expériences d'interférences lumineuses en termes de paquets d'ondes, soit à un photon, soit à deux.

2-a. Comment calculer les interférences de photons ?

En mécanique quantique non relativiste, une particule de masse m non nulle est décrite par une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$ dont le carré du module $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ donne la densité de probabilité de trouver la particule au point \mathbf{r} et à l'instant t . Dans une expérience d'interférence du type franges d'Young, et après traversée de l'écran percé de deux fentes, la fonction d'onde est une superposition linéaire de deux fonctions d'onde $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ et $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ se propageant à partir des deux fentes. Ces deux ondes se recouvrent dans une région de l'espace, où la densité de probabilité de trouver la particule au point \mathbf{r} et à l'instant t , égale à $|\psi_1(\mathbf{r}, t) + \psi_2(\mathbf{r}, t)|^2$, contient un terme $2\text{Re}\{\psi_1(\mathbf{r}, t)\psi_2^*(\mathbf{r}, t)\}$ qui oscille dans l'espace et le temps; on obtient donc des franges d'interférence.

Nous avons cependant rappelé au § 1 pourquoi il est en général impossible d'introduire pour le photon une fonction d'onde spatiale qui serait la stricte analogue de $\psi(\mathbf{r}, t)$, et dont le carré du module donnerait la densité de probabilité de présence du photon en un point. C'est pourquoi nous avons défini en (8) une amplitude $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$, dont le carré du module donne la densité de probabilité de photo-détection du photon au point \mathbf{r} et à l'instant t . Nous montrons dans le § 2-b que de telles amplitudes peuvent effectivement être utilisées pour interpréter les franges d'interférence; nous étudierons celles apparaissant sur le signal de photo-détection simple $w_I(\mathbf{r}, t)$ observé sur un paquet d'ondes à un photon ayant traversé un écran percé de deux fentes. Comme nous l'avons déjà souligné, il est important de ne pas confondre $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ avec la valeur moyenne du champ électrique dans l'état considéré – qui est d'ailleurs nulle dans un état à un photon. En électromagnétisme classique, ce sont les champs électriques (ou magnétiques) qui interfèrent; en électromagnétisme quantique, la situation est différente, et c'est en termes d'amplitudes de probabilité qu'il convient de raisonner.

Pour des états du champ contenant au moins deux photons, le signal de photo-détection double $w_{II}(\mathbf{r}_B, t_B, \mathbf{r}_A, t_A)$ n'est pas nul. Pour l'interpréter dans le cas le plus simple possible, nous commençons par supposer au § 2-c que le rayonnement est décrit par un produit tensoriel de deux paquets d'ondes à un photon³. Nous montrerons que les franges d'interférence observables sur w_{II} peuvent également être interprétées au moyen de produits d'amplitudes de probabilité de détection; ces

3. Un exemple simple d'état intriqué à deux photons, qui n'est pas un produit de deux états à un photon, sera ensuite étudié au § 5.

franges résultent d'interférences entre amplitudes de transitions associées à deux chemins différents qui conduisent le champ de l'état initial (où il contient deux photons) au vide. Dans ce cas également il faut raisonner, non pas en termes d'interférences de valeurs moyennes des champs électriques et magnétiques eux-mêmes, mais de chemins.

2-b. Signal d'interférence apparaissant sur un paquet d'ondes à un photon dans deux modes

Commençons par examiner l'expérience la plus simple d'interférence de photons, celle bien connue des franges d'Young, mais dans le cas où un seul photon est envoyé à chaque réalisation de l'expérience. Le vecteur d'état du photon unique est alors la somme de deux composantes, correspondant au passage du photon à travers l'une ou l'autre des deux fentes de l'écran. Lorsque le photon arrive dans la région d'interférence, ces deux composantes sont associées à deux modes différents du rayonnement.

α. Paquets d'ondes à un photon après traversée d'un écran percé de deux fentes

Nous nous intéressons à l'état du rayonnement une fois qu'il a traversé l'écran muni de deux fentes. Cet état est décrit par un paquet d'ondes à un photon qui, en représentation d'interaction, est de la forme :

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \quad \text{avec : } |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (11)$$

Dans cette expression, le ket $|\psi_1\rangle$ décrit le paquet d'ondes issu de la première fente, qui s'écrit comme en (1) avec une fonction $c_1(\mathbf{k})$ piquée autour de la valeur \mathbf{k}_1 ; le ket $|\psi_2\rangle$ décrit le paquet d'ondes issu de la seconde, et sa fonction $c_2(\mathbf{k})$ est piquée autour de la valeur \mathbf{k}_2 . Comme, avant traversée de l'écran, les deux paquets d'ondes sont issus d'une même source, ils sont centrés autour d'une fréquence commune $\omega_m = ck_1 = ck_2$; les modules de \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 sont donc égaux, mais leurs directions peuvent être différentes. Nous supposons enfin que les paquets d'ondes issus des deux fentes arrivent en même temps dans la région d'interférence (les chemins optiques selon les deux trajets depuis la source sont égaux) et que chacun d'entre eux dure suffisamment longtemps pour que la fréquence ω_m soit bien définie.

Comme en (8), pour chacun des deux paquets d'ondes $|\psi_i\rangle$ nous introduisons l'amplitude de détection $\mathcal{E}_i(\mathbf{r}, t)$:

$$\langle 0|E^{(+)}(\mathbf{r}, t)|\psi_i\rangle = \mathcal{E}_i(\mathbf{r}, t) \quad \text{où : } i = 1, 2 \quad (12)$$

Dans la région d'interférence, nous supposons que les deux modes⁴ sont proches d'ondes planes de vecteurs d'onde \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 . Nous posons donc :

$$\mathcal{E}_i(\mathbf{r}, t) = \mathcal{F}_i(\mathbf{r}, t) e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_m t)} \quad (13)$$

où la fonction $\mathcal{F}_i(\mathbf{r}, t)$ varie bien plus lentement dans l'espace et le temps que l'exponentielle qui la suit $e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_m t)}$.

4. Une autre possibilité serait de prendre des paquets d'ondes gaussiens de même foyer, ayant au voisinage de ce foyer des structures d'ondes planes de vecteurs d'onde différents \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 , d'extension latérale très grande devant les longueurs d'onde $2\pi/k_1$ et $2\pi/k_2$.

β . *Calcul du signal de photo-détection simple*

Nous supposons que le système physique champ est contenu dans une boîte de volume L^3 ; nous utilisons un ensemble orthonormé complet de modes du champ, de vecteurs d'onde $\{\mathbf{k}_i\}$ dont font partie \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 . La relation (B-3) du Chapitre XIX indique que la composante de fréquence positive du champ électrique s'écrit ⁵ :

$$E^{(+)}(\mathbf{r}, t) = i \sum_i \sqrt{\frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3}} e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} a_i \quad (14)$$

avec $\omega_i = c \times k_i$. Lorsque cet opérateur agit sur le ket (11), tous les termes i conduisent à un résultat nul, sauf les termes $i = 1$ et $i = 2$. Dans ce cas, on a $a_i |\psi_{1,2}\rangle = |0\rangle$, de sorte que (11) et (12) conduisent à :

$$E^{(+)}(\mathbf{r}, t) |\psi\rangle = [c_1 \mathcal{E}_1(\mathbf{r}, t) + c_2 \mathcal{E}_2(\mathbf{r}, t)] |0\rangle \quad (15)$$

La probabilité de détecter le photon au point \mathbf{r} et à l'instant t est égale au carré de la norme de ce ket. Elle s'écrit donc :

$$\langle \psi | E^{(-)}(\mathbf{r}, t) E^{(+)}(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle = \left| c_1 \mathcal{E}_1(\mathbf{r}, t) + c_2 \mathcal{E}_2(\mathbf{r}, t) \right|^2 \quad (16)$$

Il apparaît dans cette égalité des termes carrés et des termes rectangles (termes croisés). Les premiers s'écrivent, compte tenu de (13) :

$$|c_i \mathcal{E}_i(\mathbf{r}, t)|^2 = |c_i \mathcal{F}_i(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (17)$$

et varient lentement en fonction de \mathbf{r} et t . Les seconds ont pour expression :

$$c_1 c_2^* \mathcal{E}_1(\mathbf{r}, t) \mathcal{E}_2^*(\mathbf{r}, t) + c.c. = c_1 c_2^* \mathcal{F}_1(\mathbf{r}, t) \mathcal{F}_2^*(\mathbf{r}, t) \exp\{i[(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}]\} + c.c. \quad (18)$$

et présentent les modulations spatiales caractéristiques des phénomènes d'interférence (c.c. désigne le complexe conjugué).

γ . *Discussion physique*

La relation (16) montre que le signal de photo-détection est le carré du module de la somme de deux amplitudes, $c_1 \mathcal{E}_1(\mathbf{r}, t)$ et $c_2 \mathcal{E}_2(\mathbf{r}, t)$, qui interfèrent. L'amplitude $c_1 \mathcal{E}_1(\mathbf{r}, t)$ est l'amplitude de détecter au point \mathbf{r} et à l'instant t le photon dans le mode $|\psi_1\rangle$; c'est l'amplitude c_1 de trouver le champ dans l'état $|\psi_1\rangle$, multipliée par l'amplitude $\mathcal{E}_1(\mathbf{r}, t)$ de détecter le photon au point \mathbf{r} et à l'instant t si le champ est dans l'état $|\psi_1\rangle$. L'amplitude $c_2 \mathcal{E}_2(\mathbf{r}, t)$ s'interprète de façon analogue. Lors de la détection, le champ passe donc de l'état $|\psi\rangle$ écrit en (11) à l'état vide $|0\rangle$ en suivant deux chemins possibles : le photon est absorbé, soit dans le mode $|\psi_1\rangle$, soit dans le mode $|\psi_2\rangle$. Comme rien ne permet de déterminer par quel chemin le système est passé, les deux amplitudes correspondantes interfèrent. Nous retrouvons ainsi ce que nous avons annoncé plus haut : en théorie quantique du rayonnement, les franges d'interférence observables sur les signaux d'un photo-détecteur ne sont pas associées à des interférences entre deux ondes électromagnétiques classiques, mais entre deux amplitudes de transition associées à des chemins différents (conduisant le système d'un même état initial au même état final).

5. Pour simplifier, nous ignorons les variables de polarisation du champ.

2-c. Signaux d'interférence apparaissant sur un produit de deux paquets d'ondes à un photon

Montrons maintenant qu'une interprétation de même nature, en termes d'amplitudes de transition, peut être généralisée à des effets d'interférence dans des expériences à deux photons, où l'on mesure les corrélations entre les signaux fournis par deux photo-détecteurs.

α. Expression du vecteur d'état des deux photons

Nous supposons donc que le champ contient deux photons, et qu'il s'écrit comme le produit de deux paquets d'ondes de la forme (1) :

$$|\psi_{12}\rangle = \int d^3k c_1(\mathbf{k}) \int d^3k' c_2(\mathbf{k}') a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'}^\dagger |0\rangle \quad (19)$$

Peut-on observer des modulations spatiales et temporelles sur les signaux w_I et w_{II} fournis par un ou deux photo-détecteurs placés dans ce champ ? Nous allons voir que la réponse à cette question est "non" si l'on se limite aux photo-détections simples, mais "oui" si l'on prend en compte les corrélations entre doubles détections de photons.

Nous supposons les deux paquets d'ondes de (19) bien distincts : il n'existe aucun recouvrement entre le domaine D_1 où la fonction $c_1(\mathbf{k})$ n'est pas nulle et le domaine D_2 où la fonction $c_2(\mathbf{k})$ n'est pas nulle. Nous introduisons l'élément de matrice qui généralise (8) à deux photons :

$$\langle 0 | E^{(+)}(\mathbf{r}, t) E^{(+)}(\mathbf{r}', t') | \psi_{12} \rangle \quad (20)$$

Insérons dans cette expression le développement en modes plans (14) des deux opérateurs champ électrique. Pour ne pas donner zéro, les opérateurs d'annihilation de ces champs doivent agir sur un mode qui est peuplé d'un photon dans (19). Donc, soit le mode sélectionné dans $E^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ appartient au domaine D_1 et celui sélectionné dans $E^{(+)}(\mathbf{r}', t')$ au domaine D_2 , soit l'inverse. Dans le premier cas, le produit scalaire par le bra du vide de tous les modes concernés reconstruit l'amplitude de détection $\mathcal{E}_2(\mathbf{r}', t')$ associée au second paquet d'ondes, puis celle $\mathcal{E}_1(\mathbf{r}, t)$ associée au premier. Dans le second cas, les paquets d'ondes sont inversés. Le résultat est donc :

$$\langle 0 | E^{(+)}(\mathbf{r}, t) E^{(+)}(\mathbf{r}', t') | \psi_{12} \rangle = \mathcal{E}_1(\mathbf{r}, t) \mathcal{E}_2(\mathbf{r}', t') + \mathcal{E}_2(\mathbf{r}, t) \mathcal{E}_1(\mathbf{r}', t') \quad (21)$$

où les fonctions \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 sont les amplitudes de détection associées selon (8) aux deux paquets d'ondes individuels contenus dans $|\psi_{12}\rangle$.

β. Signal de photo-détection simple $w_I(\mathbf{r}, t)$

Pour obtenir l'expression du signal de photo-détection simple, commençons par calculer l'effet sur l'état (19) de la composante de fréquence positive du champ $E^{(+)}(\mathbf{r}', t')$. Comme précédemment, pour ne pas donner zéro cet opérateur doit détruire un photon, soit dans un mode pour lequel $c_1(\mathbf{k})$ n'est pas nul, soit dans un mode pour lequel $c_2(\mathbf{k})$ n'est pas nul. Dans le premier cas, la somme sur tous les modes concernés reconstruit la fonction $\mathcal{E}_1(\mathbf{r}', t')$ qui multiplie le ket vide de tous

ces modes ; les modes de l'autre paquet d'ondes restent inchangés. Dans le second cas, c'est la fonction $\mathcal{E}_2(\mathbf{r}', t')$ qui apparaît. Nous obtenons donc :

$$E^{(+)}(\mathbf{r}', t')|\psi_{12}\rangle = \left[\mathcal{E}_1(\mathbf{r}', t') \int d^3k' c_2(\mathbf{k}') a_{\mathbf{k}'}^\dagger |0\rangle + \mathcal{E}_2(\mathbf{r}', t') \int d^3k c_1(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle \right] \quad (22)$$

La probabilité par unité de temps de détecter un photon au point \mathbf{r}' et à l'instant t' est égale au carré de la norme de ce ket. Les termes en $|\mathcal{E}_1(\mathbf{r}', t')|^2$ et $|\mathcal{E}_2(\mathbf{r}', t')|^2$ contiennent le carré des normes des deux paquets d'ondes, qui valent l'unité ; ces termes n'oscillent ni dans l'espace ni dans le temps. Seuls les termes rectangles pourraient donner naissance à des modulations spatiales et temporelles ; ils contiennent cependant le produit scalaire des deux paquets d'ondes, qui est nul puisque nous les avons supposés orthogonaux (les deux domaines D_1 et D_2 n'ont aucun recouvrement). Ainsi, quand le champ est dans l'état (19), il n'apparaît aucune frange d'interférence observable sur le signal d'un photo-détecteur.

L'interprétation de ce résultat est semblable à celle que nous avons donnée plus haut. Le système peut suivre deux chemins : soit absorption d'un photon dans le premier paquet d'ondes, soit absorption d'un photon dans le second. Mais, à la différence de ce qui se produit pour l'état initial (11), ici l'état final du champ n'est pas le même pour ces deux chemins : si le photon du mode d'un paquet d'ondes a été absorbé, dans l'état final il reste le photon de l'autre paquet d'ondes. Les deux états finals associés aux deux chemins sont donc orthogonaux, de sorte qu'on pourrait (en principe) déterminer par quel chemin le système est passé en observant l'état final du champ ; c'est pourquoi les deux amplitudes ne peuvent plus interférer.

Remarque :

On peut considérer d'autres états des deux modes, contenant chacun plusieurs photons, par exemple des états $|\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle$ où chaque mode est dans un état cohérent caractérisé par une variable normale classique, α_1 pour le mode $\{\mathbf{k}_1\}$, α_2 pour le mode $\{\mathbf{k}_2\}$. On sait alors que l'état $|\alpha_1\rangle$ est un état propre de l'opérateur $E^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ avec la valeur propre $\mathcal{E}_{\text{cl}}^{(+)}(\alpha_1, \mathbf{r}, t)$ égale à la composante de fréquence positive du champ classique dans le mode $\{\mathbf{k}_1\}$, correspondant à la variable normale classique α_1 (Chapitre XVIII, § B-2). Un résultat analogue est valable pour l'état $|\alpha_2\rangle$:

$$E^{(+)}(\mathbf{r}, t)|\alpha_i\rangle = \mathcal{E}_{\text{cl}}^{(+)}(\alpha_i, \mathbf{r}, t)|\alpha_i\rangle \quad i = 1, 2 \quad (23)$$

On en déduit que :

$$E^{(+)}(\mathbf{r}, t)|\alpha_1, \alpha_2\rangle = \left[\mathcal{E}_{\text{cl}}^{(+)}(\alpha_1, \mathbf{r}, t) + \mathcal{E}_{\text{cl}}^{(+)}(\alpha_2, \mathbf{r}, t) \right] |\alpha_1, \alpha_2\rangle \quad (24)$$

La probabilité de détecter un photon au point \mathbf{r} et à l'instant t est égale au carré de la norme du ket (24). Elle est donc proportionnelle à :

$$\left| \mathcal{E}_{\text{cl}}^{(+)}(\alpha_1, \mathbf{r}, t) + \mathcal{E}_{\text{cl}}^{(+)}(\alpha_2, \mathbf{r}, t) \right|^2$$

c'est-à-dire au carré du module de la somme de deux champs classiques, ce qui apparaît comme un signal d'interférence de champs classiques. Les interférences sont alors présentes dans le signal de détection à un photon, contrairement à ce qui se passe pour l'état (19). Ceci illustre bien le caractère quasi classique des états cohérents.

γ . *Signal de photo-détection double* $w_{II}(\mathbf{r}_B, t_B, \mathbf{r}_A, t_A)$

Supposant toujours que l'état initial du champ est (19), étudions maintenant la probabilité (par double unité de temps) $w_{II}(\mathbf{r}_B, t_B, \mathbf{r}_A, t_A)$ pour qu'un détecteur placé en \mathbf{r}_A détecte un photon à l'instant t_A et qu'un autre détecteur placé en \mathbf{r}_B détecte un photon à l'instant t_B . Cette probabilité est proportionnelle à la fonction de corrélation (Complément B_{XX}, § 2-d) :

$$\langle \psi_{12} | E^{(-)}(\mathbf{r}_A, t_A) E^{(-)}(\mathbf{r}_B, t_B) E^{(+)}(\mathbf{r}_B, t_B) E^{(+)}(\mathbf{r}_A, t_A) | \psi_{12} \rangle \quad (25)$$

Puisque $|\psi_{12}\rangle$ ne contient que deux photons, nous pouvons insérer un projecteur sur le vide au milieu de cette expression, ce qui fait immédiatement apparaître l'expression (21) en module au carré. Nous obtenons ainsi :

$$w_{II}(\mathbf{r}_B, t_B; \mathbf{r}_A, t_A) \propto |\mathcal{E}_2(\mathbf{r}_B, t_B) \mathcal{E}_1(\mathbf{r}_A, t_A) + \mathcal{E}_1(\mathbf{r}_B, t_B) \mathcal{E}_2(\mathbf{r}_A, t_A)|^2 \quad (26)$$

En plus des termes carrés $|\mathcal{E}_2(\mathbf{r}_B, t_B) \mathcal{E}_1(\mathbf{r}_A, t_A)|^2$ et $|\mathcal{E}_1(\mathbf{r}_B, t_B) \mathcal{E}_2(\mathbf{r}_A, t_A)|^2$, qui varient lentement avec $\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, t_A, t_B$, apparaissent des termes rectangles :

$$\mathcal{E}_1(\mathbf{r}_B, t_B) \mathcal{E}_1^*(\mathbf{r}_A, t_A) \mathcal{E}_2(\mathbf{r}_A, t_A) \mathcal{E}_2^*(\mathbf{r}_B, t_B) + \text{c.c.}$$

qui présentent des modulations spatiales et temporelles. Si par exemple le premier paquet d'ondes est centré autour des valeurs \mathbf{k}_1 et ω_1 , et le second autour des valeurs \mathbf{k}_2 et ω_2 , ces modulations sont en :

$$\exp \left\{ i [(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot (\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B) - (\omega_1 - \omega_2)(t_A - t_B)] \right\} + \text{c.c.} \quad (27)$$

Ce résultat n'est pas contradictoire avec le fait que la probabilité de détecter un seul photon en \mathbf{r}_A, t_A , ou en \mathbf{r}_B, t_B varie lentement avec ces variables : une fois qu'un premier photon est détecté en \mathbf{r}_A, t_A , la probabilité de détecter le second photon en \mathbf{r}_B, t_B varie de manière sinusoïdale avec $\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B$ et $t_A - t_B$.

(i) *Discussion physique*

L'amplitude élevée en module au carré dans le second membre de (26) est la somme de deux amplitudes associées à deux chemins possibles conduisant le système de l'état initial $|\psi_1, \psi_2\rangle$, contenant deux photons, au même état final $|0\rangle$ où tous les modes sont vides. Dans le premier chemin, d'amplitude $\mathcal{E}_2(\mathbf{r}_B, t_B) \mathcal{E}_1(\mathbf{r}_A, t_A)$, le photon du mode \mathbf{k}_1 est absorbé en \mathbf{r}_A, t_A et le photon du mode \mathbf{k}_2 est absorbé en \mathbf{r}_B, t_B . Dans le second chemin, d'amplitude $\mathcal{E}_1(\mathbf{r}_B, t_B) \mathcal{E}_2(\mathbf{r}_A, t_A)$, c'est le contraire : le photon du mode \mathbf{k}_2 est absorbé en \mathbf{r}_A, t_A et le photon du mode \mathbf{k}_1 est absorbé en \mathbf{r}_B, t_B . Comme plus haut (§ 2-b), il se produit une interférence entre les amplitudes de transition différentes associées à deux chemins possibles conduisant le système du même état initial au même état final, sans qu'on puisse déterminer le chemin qui est suivi.

(ii) *Autre interprétation*

Le signal de photo-détection (25) peut aussi être écrit sous la forme :

$$\langle \psi_A | E^{(+)}(\mathbf{r}_B, t_B) E^{(+)}(\mathbf{r}_B, t_B) | \psi_A \rangle \quad (28)$$

avec :

$$\begin{aligned} |\psi_A\rangle &= E^{(+)}(\mathbf{r}_A, t_A) |\psi_{12}\rangle \\ &= \left[\mathcal{E}_1(\mathbf{r}_A, t_A) \int d^3k' c_2(\mathbf{k}') a_{\mathbf{k}'}^\dagger |0\rangle + \mathcal{E}_2(\mathbf{r}_A, t_A) \int d^3k c_1(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle \right] \end{aligned} \quad (29)$$

où, dans la seconde ligne, nous avons utilisé la relation (22). Le signal (28) peut donc être interprété comme la probabilité de détecter un photon avec un champ dans cet état $|\psi_A\rangle$, où le photon est avec une amplitude de probabilité $\mathcal{E}_1(\mathbf{r}_A, t_A)$ dans le premier paquet d'ondes, et avec une amplitude de probabilité $\mathcal{E}_2(\mathbf{r}_A, t_A)$ dans le second. Cette situation est analogue à celle du § 2-b- α , où nous avons vu qu'un photon dans l'état (11) donne naissance à des modulations dans la probabilité de photo-détection.

En d'autres termes, nous partons d'un état $|\psi_{12}\rangle$ qui ne contient aucune cohérence. C'est la détection d'un premier photon qui introduit un état (29) où un second se trouve dans une superposition cohérente, la cohérence provenant du fait que le photon détecté peut provenir, soit du premier paquet d'ondes, soit du second. Les coefficients de la superposition (29) dépendent du point \mathbf{r}_A et de l'instant t_A où la détection du premier photon a eu lieu. Ainsi, dans cette description du phénomène, c'est la première détection qui introduit des corrélations quantiques entre les deux modes, et c'est la dépendance de ces corrélations en fonction de \mathbf{r}_A et t_A qui explique les oscillations de la probabilité de la seconde détection en fonction de $\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A$ et $t_B - t_A$.

3. Amplitude d'absorption d'un photon par un atome

Nous remplaçons le photo-détecteur à bande large par un atome à deux niveaux discrets, a (fondamental) et b (excité). L'atome est placé en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$, et interagit avec le même paquet d'ondes $|\psi\rangle$ donné en (1). Nous nous proposons de calculer maintenant l'amplitude de probabilité pour que l'atome, initialement dans l'état a , absorbe le photon incident et soit trouvé dans l'état b à l'instant t .

3-a. Calcul de l'amplitude

Les états initial et final de ce processus sont :

$$|\psi_{\text{in}}\rangle = |a; \psi\rangle \quad |\psi_{\text{fin}}\rangle = |b; 0\rangle \quad (30)$$

puisque l'absorption du photon fait passer le rayonnement de l'état $|\psi\rangle$ au vide $|0\rangle$. D'après la relation (B-4) du Chapitre XX, l'amplitude recherchée s'écrit, au premier ordre en H_I :

$$\langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(t, -\infty) | \psi_{\text{in}} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle \psi_{\text{fin}} | \bar{H}_I(t') | \psi_{\text{in}} \rangle \quad (31)$$

où la barre sur les opérateurs signifie que ces derniers sont pris dans le point de vue d'interaction par rapport à l'hamiltonien non perturbé.

L'hamiltonien d'interaction H_I est donné par⁶ :

$$H_I = -DE^{(+)}(\mathbf{r} = \mathbf{0}) \quad (32)$$

L'élément de matrice de $\bar{H}_I(t')$ figurant dans (31) vaut :

$$\langle \psi_{\text{fin}} | \bar{H}_I(t') | \psi_{\text{in}} \rangle = -\mathcal{D}e^{i\omega_0 t'} \langle 0 | E^{(+)}(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t') | \psi \rangle \quad (33)$$

6. Comme nous avons ignoré les degrés de liberté de polarisation du rayonnement, nous ignorons ici aussi le caractère vectoriel du dipôle atomique \mathbf{D} . L'opérateur D apparaissant dans (32) est en fait la projection de \mathbf{D} sur le vecteur polarisation du rayonnement.

Dans cette égalité, $\mathcal{D} = \langle b|D|a\rangle$, $\omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$ est la fréquence de la transition atomique, et $E^{(+)}(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t')$ la composante de fréquence positive du champ électrique en représentation d'interaction. En utilisant la notation (8) pour l'élément de matrice du second membre de (33), nous obtenons :

$$\langle \psi_{\text{fin}} | \bar{H}_I(t') | \psi_{\text{in}} \rangle = -\mathcal{D} e^{i\omega_0 t'} \mathcal{E}(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t') \quad (34)$$

ce qui permet de ré-écrire l'amplitude d'absorption (31) sous la forme :

$$\langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(t, -\infty) | \psi_{\text{in}} \rangle = -\frac{\mathcal{D}}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_0 t'} \mathcal{E}(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t') \quad (35)$$

La quantité $-\mathcal{D}\mathcal{E}(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t')$ qui figure dans cette expression peut être considérée comme l'hamiltonien d'interaction entre le dipôle atomique \mathcal{D} et un champ classique $\mathcal{E}(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t')$. Le champ $\mathcal{E}(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t')$ apparaît donc comme le champ classique qui donnerait la même amplitude de transition entre les deux états a et b de l'atome que le champ quantique, lorsque le rayonnement est dans le paquet d'ondes à un photon décrit par $c(k)$.

3-b. Propriétés de l'amplitude

Revenons au paquet d'ondes dans l'espace infini (1) et utilisons la relation (8) pour obtenir l'amplitude de probabilité de détection du photon au point $\mathbf{r} = \mathbf{0}$. Si nous écrivons l'opérateur champ (4) avec une intégration sur d^3k' au lieu de d^3k , et si nous l'appliquons à (1), la commutation des opérateurs $a(\mathbf{k}')$ et $a^\dagger(\mathbf{k})$ fait apparaître une fonction $\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, et nous obtenons :

$$\langle 0 | E^{(+)}(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t') | \psi \rangle = \mathcal{E}(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t') = \frac{i}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2\varepsilon_0}} c(k) e^{-i\omega t'} \quad (36)$$

où $\omega_k = c \times k$. Comme $c(k)$ est centrée autour d'un vecteur d'onde moyen k_m , supposé très grand devant la largeur Δk de $c(k)$, l'amplitude (36) peut s'écrire sous la forme :

$$\mathcal{E}(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t') = e^{-i\omega_m t'} \mathcal{F}(t') \quad (37)$$

qui est le produit d'une porteuse de fréquence $\omega_m = ck_m$ par une enveloppe $\mathcal{F}(t')$. Cette dernière varie en fonction de t' plus lentement que l'exponentielle qui la précède ; elle peut par exemple prendre la forme d'une courbe en cloche centrée en $t = 0$ et de largeur $\Delta t \simeq 1/c\Delta k$. En reportant (37) dans (35), nous obtenons :

$$\langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(t, -\infty) | \psi_{\text{in}} \rangle = -i \int_{-\infty}^t dt' e^{i(\omega_0 - \omega_m)t'} \Omega_1(t') \quad (38)$$

où $\Omega_1(t')$ est la fréquence de Rabi instantanée définie par :

$$\hbar\Omega_1(t') = -\mathcal{D}\mathcal{F}(t') \quad (39)$$

L'équation (38) permet de comprendre le comportement de l'amplitude d'absorption du photon incident quand t croît de $-\infty$ à $+\infty$. Tant que $t \ll -\Delta t$, les deux fonctions $\mathcal{E}(t')$ et $\Omega_1(t')$ sont nulles ; le paquet d'ondes incident n'est pas encore

arrivé au voisinage de l'atome de sorte qu'aucune absorption du photon ne peut se produire. Puis, quand t croît de $-\Delta t$ à $+\Delta t$, le paquet d'ondes défile sur l'atome de sorte que l'intégrale de (38) croît. Quand $t \gg +\Delta t$, le paquet d'ondes a quitté l'atome ; l'amplitude d'absorption reste alors constante et égale à :

$$\langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(+\infty, -\infty) | \psi_{\text{in}} \rangle = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{i(\omega_0 - \omega_m)t'} \Omega_1(t') \quad (40)$$

Cette expression donne donc l'amplitude pour qu'un photon ait été absorbé après le passage du paquet d'ondes incident au voisinage de l'atome. Nous retrouvons donc bien les résultats du Chapitre XX, mais cette fois sans que les instants initial et final du processus aient été introduits artificiellement.

Donnons un ordre de grandeur de l'amplitude (40). Supposons tout d'abord que $\omega_m = \omega_0$ (paquet d'ondes résonnant). L'intégrale de (40) est alors de l'ordre de $\Omega_1^{\text{max}} \Delta t$, où Ω_1^{max} est la valeur maximale de la fréquence de Rabi atteinte quand le centre du paquet d'ondes est sur l'atome et que l'enveloppe $\mathcal{F}(t')$ atteint la plus grande valeur possible. Quand $\omega_m \neq \omega_0$ (paquet d'ondes hors résonance), l'amplitude d'absorption est plus faible. D'après (40), cette amplitude n'est autre que la transformée de Fourier de $\Omega_1(t')$ à la fréquence $\omega_0 - \omega_m$. Ce résultat ne fait qu'exprimer la conservation de l'énergie : pour que le photon incident soit absorbé, sa fréquence doit être égale à celle de la transition atomique. Cependant, comme l'enveloppe du champ varie sur des intervalles de temps de l'ordre de Δt , ceci n'impose pas une stricte égalité entre fréquence moyenne du photon et fréquence atomique ; l'égalité ne doit être réalisée qu'à $\Delta\omega \simeq 1/\Delta t$ près.

4. Diffusion d'un paquet d'ondes

Nous étudions maintenant un processus mettant en jeu deux atomes : un paquet d'ondes arrive sur un atome A placé en \mathbf{r}_A sur l'axe z , interagit avec lui, se trouve diffusé dans toutes les directions, et interagit avec un second atome B placé en \mathbf{r}_B . Le paquet d'ondes incident qui se propage dans la direction Oz est décrit par la fonction $c(\mathbf{k})e^{-i\omega t}$. Comme plus haut, nous poursuivons deux buts. Le premier est, en assimilant l'atome B à un dispositif de mesure du photon diffusé par A , de confirmer l'interprétation de $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ comme une amplitude de détection du photon au point \mathbf{r}_B . Le second est d'étudier la dépendance temporelle du processus de diffusion lui-même.

Nous allons donc calculer les dépendances spatiale et temporelle du paquet d'ondes diffusé, en particulier lorsque la fréquence centrale ω_m du paquet d'ondes incident est proche de la fréquence de résonance ω_0 de l'atome diffuseur. Nous calculerons ensuite l'amplitude pour que l'atome B soit excité à l'instant t depuis son état fondamental a à son état excité b par le paquet d'ondes diffusé. Comme au § 1, nous pourrions associer à cette amplitude un paquet d'ondes spatial décrivant le défilement du paquet d'ondes diffusé au voisinage du point \mathbf{r}_B .

4-a. Amplitude d'absorption par l'atome B du photon diffusé par l'atome A

Commençons par considérer un photon de vecteur d'onde \mathbf{k}_i parallèle à l'axe z et de fréquence $\omega_i = ck_i$. Nous nous intéressons à l'amplitude de probabilité $\langle \mathbf{k}_f | S | \mathbf{k}_i \rangle$ pour que ce photon soit diffusé par l'atome A situé en \mathbf{r}_A de l'état \mathbf{k}_i vers l'état

\mathbf{k}_f . Cette amplitude est donnée par la relation (E-3) du Chapitre XX, où nous ne prenons en compte que les processus résonnant α (nous supposons que la fréquence du photon incident n'est pas très éloignée de la fréquence de résonance atomique) :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_f | S | \mathbf{k}_i \rangle &= \langle \psi_{\text{fin}} | \bar{U}(\Delta t, 0) | \psi_{\text{in}} \rangle \\ &= -2\pi i A_{f_i}^\alpha(E_{\text{in}}) \delta^{(\Delta t)}(E_{\text{fin}} - E_{\text{in}}) \equiv \mathcal{B} \delta^{(\Delta t)}(\omega_f - \omega_i) \end{aligned} \quad (41)$$

Dans cette relation, $A_{f_i}^\alpha(E_{\text{in}})$ est obtenu à partir de la relation (E-4) du Chapitre XX (nous supposons à nouveau le rayonnement contenu dans un cube de volume L^3) :

$$A_{f_i}^\alpha(E_{\text{in}}) = -\frac{\hbar\sqrt{\omega_i\omega_f}}{2\varepsilon_0 L^3} \sum_c \frac{\langle a | \boldsymbol{\varepsilon}_f^* \cdot \mathbf{D} | c \rangle \langle c | \boldsymbol{\varepsilon}_i \cdot \mathbf{D} | a \rangle}{E_a + \hbar\omega_i - E_c} e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{r}_A} \quad (42)$$

où nous avons introduit au second membre une exponentielle qui provient de la dépendance spatiale du champ électrique : ici, et comme dans le Chapitre XX, nous traitons classiquement la position \mathbf{r}_A de l'atome, mais nous ne supposons plus qu'elle est fixée à l'origine des axes. L'expression (42) est un produit de deux éléments de matrice de l'hamiltonien d'interaction, un pour l'absorption du photon \mathbf{k}_i , l'autre pour l'émission du photon \mathbf{k}_f , le tout divisé par un dénominateur d'énergie. La fonction $\delta^{(\Delta t)}(\omega_f - \omega_i)$ exprime simplement la conservation de l'énergie à $\hbar/\Delta t$ près dans le processus de diffusion élastique, comme par exemple dans les §§ B-1-b et E-1-b du Chapitre XX ; nous supposons que le temps d'interaction Δt est suffisamment long pour qu'elle soit assimilable à une véritable fonction delta $\delta(\omega_f - \omega_i)$.

Le coefficient \mathcal{B} que nous avons introduit dans la seconde égalité (41) est proportionnel à l'expression (42) ; il contient le produit de deux éléments de matrice, qui dépend des angles polaires θ et φ du vecteur \mathbf{k}_f par rapport à la direction de \mathbf{k}_i . Cette dépendance est donc caractérisée par une fonction $f(k, \theta, \varphi)$, avec :

$$k = |\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f| \quad (43)$$

Puisque nous avons supposé que la fréquence ω_i du photon incident est proche de résonance, nous pouvons utiliser les résultats du § E-2 du Chapitre XX concernant la diffusion résonnante ; comme dans la relation (E-11) de ce chapitre, nous écrivons le dénominateur d'énergie sous la forme $\omega_i - \omega_0 + i\Gamma/2$, où Γ est la largeur naturelle de l'état excité de l'atome diffuseur A. L'amplitude (41) devient alors :

$$\langle \mathbf{k}_f | S | \mathbf{k}_i \rangle = C_k \frac{f(k, \theta, \varphi)}{\omega_i - \omega_0 + i\Gamma/2} e^{i[(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{r}_A]} \delta(\omega_f - \omega_i) \quad (44)$$

où C_k est un coefficient proportionnel à \sqrt{k} .

Passons maintenant à l'étape suivante, l'interaction de l'atome B avec le photon \mathbf{k}_f . Comme en (33), elle est décrite par un élément de matrice (à nouveau, nous devons introduire une exponentielle pour tenir compte du fait que l'atome B n'est pas situé à l'origine des axes mais en \mathbf{r}_B) :

$$-\mathcal{D} e^{i\omega_0 t'} \langle 0 | E^{(+)}(\mathbf{r}_B, t') | a; \mathbf{k}_f \rangle \propto e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_B} e^{i(\omega_0 - \omega_f) t'} \quad (45)$$

Nous cherchons maintenant l'amplitude à l'instant t du processus complet, diffusion par A du photon \mathbf{k}_i avec une amplitude donnée par (44) et absorption par B avec une amplitude donnée par (45). Nous effectuons donc le produit de ces deux amplitudes, puis sommons ce produit sur tous les vecteurs \mathbf{k}_f possibles du photon diffusé, ainsi que sur la combinaison linéaire d'états \mathbf{k}_i formant le paquet d'ondes incident.

4-b. Paquet d'ondes diffusé par l'atome A

Pour étudier les propriétés du paquet d'ondes diffusé par l'atome A, nous commençons par procéder successivement aux deux sommations.

α. Sommation sur toutes les directions possibles du photon diffusé

Commençons par la sommation sur \mathbf{k}_f . La sommation sur le module de \mathbf{k}_f entraîne, compte tenu de la fonction $\delta(\omega_f - \omega_i)$ apparaissant dans (44), que :

$$k_f = k_i = k \quad (46)$$

En regroupant les termes dépendant de \mathbf{k}_f dans (44) et (45), on trouve que la sommation sur les directions de \mathbf{k}_f introduit l'intégrale angulaire :

$$\int d\Omega f(k, \theta, \varphi) e^{i\mathbf{k}_f \cdot (\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A)} \quad (47)$$

La sommation sur les angles polaires θ, φ des exponentielles décrivant le déphasage entre \mathbf{r}_A et \mathbf{r}_B de toutes les ondes planes \mathbf{k}_f donne naissance à une onde sphérique centrée en \mathbf{r}_A :

$$\int d\Omega f(k, \theta, \varphi) e^{i\mathbf{k}_f \cdot (\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A)} \propto f(k, \theta_B, \varphi_B) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \text{avec} \quad r = |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A| \quad (48)$$

où θ_B et φ_B sont les angles polaires du vecteur $\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A$ par rapport à la direction \mathbf{k}_i du photon incident. Le second membre de (48) rappelle un résultat classique de la théorie des collisions – cf. par exemple la relation (B.12) du Chapitre VIII. Il exprime que la somme de toutes les ondes planes diffusées par l'atome A situé en \mathbf{r}_A possède la structure d'une onde sphérique sortante de même nombre d'onde k que les ondes \mathbf{k}_f qui lui donnent naissance. L'amplitude de cette onde sphérique varie en $1/r$, ce qui assure que l'énergie sortant à travers une sphère de rayon r et de surface $4\pi r^2$ ne dépend pas de r .

Le fait que les angles polaires θ_B et φ_B apparaissant dans le second membre de (48) soient ceux du vecteur $\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A$ peut se comprendre par des arguments de phase stationnaire. En effet, le facteur de phase $e^{i\mathbf{k}_f \cdot (\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A)}$ associé à l'onde diffusée \mathbf{k}_f est égal à $e^{ikr \cos \alpha_f}$, où α_f est l'angle entre \mathbf{k}_f et $\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A$; comme $kr \gg 1$, ce facteur de phase varie très vite avec α_f , sauf au voisinage des points où les variations de $\cos \alpha_f$ avec α_f sont stationnaires, c'est-à-dire quand $\alpha_f = 0$ pour l'onde sortante. L'intégrale angulaire (47) privilégie donc les angles polaires θ_B et φ_B du vecteur $\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A$.

De (44) et (45), on déduit, compte tenu de (48) :

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}_f} \langle b; 0 | \bar{H}_I(t') | a; \mathbf{k}_f \rangle \langle \mathbf{k}_f | S | \mathbf{k}_i \rangle \\ & \propto f(k, \theta_B, \varphi_B) \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\Gamma/2} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_A} e^{i(\omega_0 - \omega)t'} \end{aligned} \quad (49)$$

où nous avons remplacé ω_i et ω_f par ω .

$\beta.$ *Sommation sur les énergies*

L'état initial du processus de diffusion est une superposition d'états $|\mathbf{k}_i\rangle$ multipliés par $c(\mathbf{k}_i)$. Considérons un paquet d'ondes à une dimension se propageant le long de l'axe Oz . Par un choix approprié de l'origine des axes, nous pouvons supposer que la position de l'atome A est en $\mathbf{r} = 0$, ce qui revient à remplacer \mathbf{r}_A par $\mathbf{0}$. Comme plus haut nous supposons que $c(k)$ est réel, de sorte que le paquet d'ondes est centré, à $t = 0$, sur la position $\mathbf{r} = 0$ de l'atome diffuseur A.

Nous devons donc maintenant multiplier (49) par $c(k)$ et intégrer sur k et sur t' de $-\infty$ à t . L'amplitude d'absorption par l'atome B, à l'instant t , du photon diffusé par l'atome A est donc proportionnelle à :

$$\int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_0 t'} \int d\omega c(\omega) \sqrt{\omega} f(\omega, \theta_B, \varphi_B) \frac{e^{i\omega r/c}}{r} \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\Gamma/2} e^{-i\omega t'} \quad (50)$$

où nous avons remplacé la variable d'intégration k par $\omega = ck$.

Comparons (50) et (35). L'intégrale sur ω qui figure dans l'intégrale sur t' de (50) apparaît comme le champ classique diffusé à l'instant t' et à une distance r du point O sur l'axe d'angles polaires θ_B et φ_B :

$$\mathcal{E}_{\text{diff}}(r, \theta_B, \varphi_B, t') \propto \int d\omega c(\omega) \sqrt{\omega} f(\omega, \theta_B, \varphi_B) \frac{e^{i\omega r/c}}{r} \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\Gamma/2} e^{-i\omega t'} \quad (51)$$

Il sera utile pour la suite de regrouper les deux exponentielles de (50) et de poser :

$$\tilde{t} = t' - r/c \quad (52)$$

Il vient alors :

$$\mathcal{E}_{\text{diff}}(r, \theta_B, \varphi_B, t') = \int d\omega c(\omega) \sqrt{\omega} f(\omega, \theta_B, \varphi_B) \frac{1}{r} \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\Gamma/2} e^{-i\omega \tilde{t}} \quad (53)$$

ce qui montre que le paquet d'ondes diffusé le long de la direction θ_B, φ_B se déplace à la vitesse c , et que son amplitude décroît en $1/r$.

$\gamma.$ *Dépendance spatiale et temporelle du paquet d'ondes diffusé*

Nous supposons maintenant que la largeur en fréquences $\Delta\omega$ du paquet d'ondes incidentes est très petite devant sa fréquence moyenne ω_m :

$$\Delta\omega \ll \omega_m \quad (54)$$

mais ne faisons aucune hypothèse sur les valeurs relatives de $\Delta\omega$ et Γ . Le facteur en $\sqrt{\omega}$ des relations précédentes peut alors être remplacé par $\sqrt{\omega_m}$ et sort de l'intégrale. Nous pouvons également négliger les variations avec ω de $f(\omega, \theta_B, \varphi_B)$ sur l'intervalle de largeur Γ où la fonction $(\omega - \omega_0 + i\Gamma/2)^{-1}$ varie de façon importante. Le champ diffusé $\mathcal{E}_{\text{diff}}(r, \tilde{t})$ apparaît alors comme la transformée de Fourier temporelle du produit des deux fonctions $c(\omega)$ et $(\omega - \omega_0 + i\Gamma/2)^{-1}$. Ce champ est donc le produit de convolution des transformées de Fourier de ces deux fonctions de ω . Pour la première fonction, on a, compte tenu de (36) et (37) :

$$c(\omega) \xleftrightarrow{TF} \mathcal{E}(\tilde{t}) = e^{-i\omega_m \tilde{t}} \mathcal{F}(\tilde{t}) \quad (55)$$

Pour la seconde fonction, on a :

$$\frac{1}{\omega - \omega_0 + i\Gamma/2} \xleftrightarrow{TF} e^{-i\omega_0 \tilde{t}} \theta(\tilde{t}) e^{-\Gamma \tilde{t}/2} \quad (56)$$

où $\theta(\tilde{t})$ est la fonction de Heaviside égale à 1 pour $\tilde{t} > 0$, à 0 pour $\tilde{t} < 0$. On en déduit que :

$$\mathcal{E}_{\text{diff}}(r, \tilde{t}) \propto \frac{1}{r} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-i\omega_m \tau} \mathcal{F}(\tau) e^{-i\omega_0(\tilde{t}-\tau)} \theta(\tilde{t}-\tau) e^{-\Gamma(\tilde{t}-\tau)/2} \quad (57)$$

$\delta.$ *Etude de deux cas limites*

Deux limites intéressantes correspondent à des valeurs de la largeur $\Delta\omega$ du paquet d'ondes incident, soit très grandes, soit très petites devant la largeur naturelle Γ du niveau excité de l'atome A.

Limite $\Delta\omega \gg \Gamma$

Le paquet d'ondes incident passe en un point donné en un temps $1/\Delta\omega$ très court devant la durée de vie radiative $1/\Gamma$ de l'état excité b . L'enveloppe $\mathcal{F}(\tau)$ du paquet d'ondes incident n'est différente de zéro que pendant un temps très court devant les temps caractéristiques de la transformée de Fourier de $(\omega - \omega_0 + i\Gamma/2)^{-1}$. On peut donc faire $\tau = 0$ dans les deux derniers termes de (57), ce qui donne :

$$\mathcal{E}_{\text{diff}}(r, \tilde{t}) \propto \frac{1}{r} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i(\omega_0 - \omega_m)\tau} \mathcal{F}(\tau) \right] \left[e^{-i\omega_0 \tilde{t}} \theta(\tilde{t}) e^{-\Gamma \tilde{t}/2} \right] \quad (58)$$

Le terme dans le premier crochet est proportionnel à l'amplitude d'excitation de l'atome diffuseur A par le paquet d'ondes incident. Le second crochet décrit une oscillation libre à la fréquence atomique ω_0 , débutant à l'instant $\tilde{t} = 0$ et amortie sur un temps $2/\Gamma$.

L'interprétation physique de ce résultat est la suivante. Le paquet d'ondes incident qui passe en un temps très court sur l'atome A, excite ce dernier de manière percussionnelle et s'éloigne à la vitesse c . Le dipôle atomique ainsi excité, une fois le paquet d'ondes incident passé, oscille librement à la fréquence ω_0 et s'amortit sous l'effet de l'émission spontanée. On obtient ainsi une situation analogue à l'excitation percussionnelle d'un oscillateur en mécanique classique.

Limite $\Delta\omega \ll \Gamma$

On peut dans (57) remplacer $\mathcal{F}(\tau)$ par $\mathcal{F}(\tilde{t})$; en effet, $\tilde{t} - \tau$ ne peut être plus grand en module que $1/\Gamma$, à cause de la dernière exponentielle de (57) et du fait que $\mathcal{E}(\tilde{t})$ varie très lentement sur cet intervalle de temps quand $\Delta\omega \ll \Gamma$. On peut alors ré-écrire (57) sous la forme :

$$\mathcal{E}_{\text{diff}}(r, \tilde{t}) \propto \mathcal{F}(\tilde{t}) e^{-i\omega_m \tilde{t}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\omega_m(\tilde{t}-\tau)} e^{-i\omega_0(\tilde{t}-\tau)} \theta(\tilde{t}-\tau) e^{-\Gamma(\tilde{t}-\tau)/2} \quad (59)$$

Effectuons le changement de variables $\tau' = \tilde{t} - \tau$ dans l'intégrale sur τ . Compte tenu de (56), on trouve alors que cette intégrale n'est autre que la transformée de Fourier de $e^{-i\omega_0 \tau'} \theta(\tau') e^{-\Gamma \tau'/2}$ évaluée en ω_m , c'est-à-dire $(\omega_m - \omega_0 + i\Gamma/2)^{-1}$. On obtient donc :

$$\mathcal{E}_{\text{diff}}(r, \tilde{t}) \propto \mathcal{F}(\tilde{t}) e^{-i\omega_m \tilde{t}} \frac{1}{\omega_m - \omega_0 + i\Gamma/2} \quad (60)$$

L'interprétation physique de ce résultat est la suivante. Quand $\Delta\omega \ll \Gamma$, le paquet d'ondes met un temps très long à passer sur l'atome A, de sorte que le dipôle de cet atome atteint un régime d'oscillation forcée à la fréquence ω_m . Il émet alors un rayonnement à la même fréquence, et avec une amplitude qui suit adiabatiquement les variations lentes de l'enveloppe $\mathcal{F}(\hat{t})$ du paquet d'ondes incident ; c'est ce qui explique le premier terme de (60). Le second terme décrit la réponse linéaire du dipôle de fréquence propre ω_0 et de temps d'amortissement $2/\Gamma$ à une excitation de fréquence ω_m . Ici, l'amplitude de l'oscillateur suit adiabatiquement celle de l'excitation.

5. Exemple de paquet d'ondes à deux photons intriqués

Nous avons considéré dans le § 2-c des états à deux photons qui sont des produits tensoriels de deux paquets d'ondes à un photon, donc sans aucune intrication. Il existe bien sûr de nombreux états à deux photons qui ne peuvent pas être écrits sous la forme d'un produit de deux états à un photon, et décrivent donc des photons intriqués. Dans cette dernière partie, nous étudions un exemple de ce type, où les photons intriqués apparaissent dans un processus d'optique non linéaire appelé *conversion paramétrique*. L'intérêt d'un tel processus est de donner naissance à des paires de photons très groupés dans le temps : la détection d'un photon de la paire à un instant donné t entraîne que la détection du second photon a lieu à un intervalle de temps très court après la première.

5-a. Conversion paramétrique

Les calculs relatifs à la conversion paramétrique sont semblables à d'autres que nous avons déjà effectués. C'est pourquoi nous nous contenterons d'en décrire les grandes lignes, qui permettent d'en comprendre l'essentiel de la physique, sans aller dans des détails qui seraient trop longs pour avoir leur place dans ce complément.

$\alpha.$ Description du processus

Dans le § E-1 du Chapitre XX, nous avons étudié la diffusion élastique d'un photon par un atome. Les Figures 2 et 3 du Chapitre XX donnent deux représentations diagrammatiques possibles d'un tel processus : un photon incident de fréquence angulaire ω_i est absorbé et un photon ω_f émis, tandis que l'atome retourne au niveau de départ ; la conservation de l'énergie du système total atome + photon implique que $\omega_i = \omega_f$. Ici, nous étudions un processus de diffusion non linéaire au cours duquel, comme précédemment, un photon incident de fréquence angulaire ω_0 est absorbé par un atome dans l'état a , mais où ce sont deux photons de fréquences angulaires ω_1 et ω_2 qui sont émis. L'atome retourne à la fin du processus de diffusion dans l'état a ; la conservation de l'énergie implique alors que $\omega_0 = \omega_1 + \omega_2$. La Figure 1 donne deux représentations possibles d'un tel processus, analogues à celles des figure 2. α et 3. α du Chapitre XX.

Plusieurs ordres temporels sont possibles pour les processus d'absorption et d'émission. Par exemple, les Figures 3. α et 3. β du Chapitre XX diffèrent par l'ordre temporel des processus d'absorption et d'émission dans la diffusion d'un photon. Pour le processus à trois photons considéré ici, comportant une absorption et deux

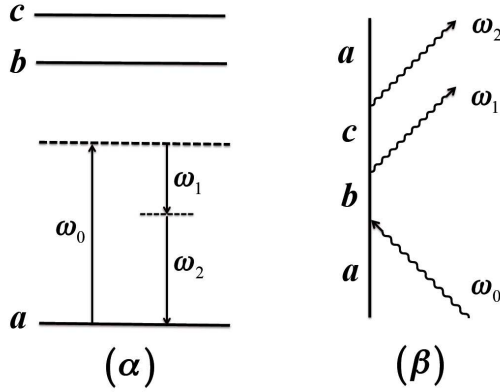


FIGURE 1 – Un photon incident, de fréquence angulaire ω_0 , est diffusé par un système atomique dans l'état initial a . A la fin du processus de diffusion, le système atomique est revenu dans l'état a , tandis que deux nouveaux photons sont apparus avec des fréquences angulaires ω_1 et ω_2 . La conservation de l'énergie implique que $\omega_0 = \omega_1 + \omega_2$. Sur la partie gauche de la figure, les processus d'absorption (d'émission) sont représentés par des flèches montantes (descendantes); sur la partie droite, ce sont des flèches entrantes (sortantes), et les flèches ondulées symbolisent la propagation des photons.

émissions, $3! = 6$ ordres temporels possibles devraient a priori être considérés; la Figure 1 ne représente que l'un de ces six ordres possibles.

β . Amplitude de diffusion

Le principe du calcul de l'amplitude de diffusion d'un processus de conversion paramétrique est analogue à celui qui nous a conduits aux formules (E-3) à (E-5) du Chapitre XX, mais fait intervenir trois interactions avec le champ au lieu de deux; deux états relais (au lieu d'un seul) interviennent. Par exemple, pour le processus représenté sur la Figure 1, on doit considérer les états suivants :

- état initial : $|a; \omega_0\rangle$, d'énergie $E_{in} = E_a + \hbar\omega_0$
- premier état relais : $|b; 0\rangle$, d'énergie $E_{rel\ 1} = E_b$
- deuxième état relais : $|c; \omega_1\rangle$, d'énergie $E_{rel\ 2} = E_c + \hbar\omega_1$
- état final : $|a; \omega_1, \omega_2\rangle$, d'énergie $E_{fin} = E_a + \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2$

L'amplitude de probabilité associée à ce processus est obtenue par généralisation de la relation (E-4) du Chapitre XX. A un facteur constant et sans importance près, elle est le produit d'une fonction $\delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_0)$ exprimant la conservation de l'énergie⁷ par l'expression :

$$- \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \right)^{3/2} \sqrt{\omega_0 \omega_1 \omega_2} \sum_{b,c} \frac{\langle a | \boldsymbol{\varepsilon}_2^* \cdot \mathbf{D} | c \rangle \langle c | \boldsymbol{\varepsilon}_1^* \cdot \mathbf{D} | b \rangle \langle b | \boldsymbol{\varepsilon}_0 \cdot \mathbf{D} | a \rangle}{(E_a + \hbar\omega_2 - E_c)(E_a + \hbar\omega_0 - E_b)} \tag{61}$$

7. Comme au § 4-a, nous supposons le temps total d'interaction Δt suffisamment long pour que la fonction $\delta^{(\Delta t)}$ soit assimilable à une véritable fonction delta.

où ε_0 , ε_1 et ε_2 sont respectivement les polarisations des photons de fréquences ω_0 , ω_1 et ω_2 . Comparée à la relation (E-4) du Chapitre XX, l'expression (61) contient donc trois éléments de matrice au numérateur (au lieu de deux), et deux (au lieu d'un) dénominateurs d'énergie contenant la différence entre l'énergie de l'état initial et celles des états relais 1 et 2.

Six amplitudes similaires peuvent être écrites, qui généralisent les équations (E-3) à (E-5) du Chapitre XX et correspondent à des ordres temporels différents des processus d'absorption et d'émission. Une fois leur somme effectuée, il faut également sommer ces amplitudes sur tous les états atomiques relais b et c . Toutes les contributions à l'amplitude contiennent la même fonction $\delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_0)$.

L'état final du système "atome + rayonnement" à la fin du processus de diffusion est la somme sur ω_1 et ω_2 des composantes ainsi obtenues, avec la condition $\omega_1 + \omega_2 = \omega_0$. Il peut donc s'écrire :

$$|\Psi\rangle = |a\rangle \otimes |\psi_R\rangle, \quad (62)$$

où :

$$|\psi_R\rangle = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_0) g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) |\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2\rangle \quad (63)$$

avec $\omega_{1,2} = c|\mathbf{k}_{1,2}|$. Cet état ne peut être mis sous la forme d'un produit de deux états du champ ; il est donc intriqué (Chapitre XXI).

La fonction $g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ qui caractérise l'état du champ résulte de la dépendance en ω_1 et ω_2 des amplitudes de diffusion, ainsi que des densités d'états finals apparaissant dans les sommations sur les continuums⁸ ω_1 et ω_2 (somme sur les modules des deux vecteurs \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2). Nous supposons ici que toutes les énergies de tous les états relais sont très éloignées de toute résonance, de sorte que la dépendance en $|\mathbf{k}_1|$ et $|\mathbf{k}_2|$ de $g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ ne présente aucune structure étroite. En d'autres termes, toutes les différences d'énergie $\Delta E = E_{\text{in}} - E_{\text{rel}}$ aux dénominateurs des amplitudes de diffusion sont de l'ordre d'une fraction de fréquence optique. Nous avons vu dans la remarque (i) à la fin du § 1 du Complément A_{XX} que le temps passé dans un état relais au cours du processus de diffusion est, d'après la relation d'incertitude temps-énergie, de l'ordre de $\hbar/|\Delta E|$. Il en découle que les temps séparant les émissions des deux photons ω_1 et ω_2 ne peuvent différer que de quelques périodes optiques, soit encore quelques dizaines de femto-secondes. Ce raisonnement qualitatif montre que les deux photons ω_1 et ω_2 sont émis de façon quasi simultanée.

Remarque :

Si l'hamiltonien d'interaction intervenant dans les trois éléments de matrice de l'amplitude de diffusion est l'hamiltonien dipolaire électrique, et si les états atomiques ont une parité bien définie, la parité atomique change lors de chaque interaction. A l'issue des trois interactions, la parité a donc changé, ce qui interdit à l'état final de l'atome d'être le même que l'état initial. Le processus de génération paramétrique que nous avons étudié ne peut donc exister que si les états atomiques n'ont pas une parité bien définie. Une telle situation est réalisée si l'hamiltonien atomique n'est pas invariant par réflexion. C'est ce qui se produit par exemple si l'atome est inséré dans un cristal où le champ cristallin, qui a la symétrie d'un champ électrique extérieur, n'est pas invariant par réflexion d'espace.

8. Deux continuums d'états finals apparaissent dans ce problème, mais la condition $\omega_1 + \omega_2 = \omega_0$ les réduit à un seul.

5-b. Corrélations temporelles entre les deux photons obtenus par conversion paramétrique

Evaluons maintenant le signal de détection double issu des deux photons engendrés par conversion paramétrique. L'expérience que nous analysons est schématiquement représentée sur la Figure 2. Un faisceau pompe incident, de fréquence ω_0 , se propage le long de la direction de vecteur unitaire \mathbf{u}_0 , et arrive sur un cristal non linéaire O contenant les atomes qui effectuent la conversion. On suppose que deux diaphragmes placés devant les deux détecteurs D_1 et D_2 permettent de sélectionner deux directions de vecteurs unitaires \mathbf{u}_1 et \mathbf{u}_2 pour les deux faisceaux générés par conversion paramétrique.

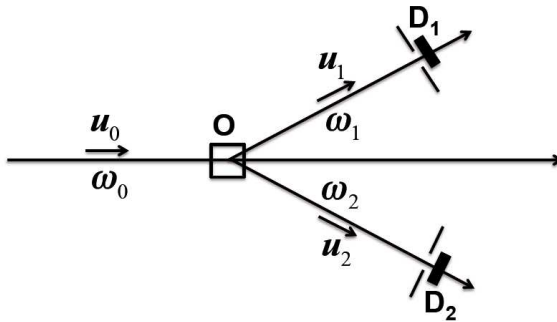


FIGURE 2 – Un faisceau pompe de fréquence angulaire ω_0 , et se propageant le long de la direction de vecteur unitaire \mathbf{u}_0 , arrive sur un cristal non linéaire placé en O. Le processus de conversion paramétrique donne naissance à deux faisceaux de fréquences ω_1 et ω_2 , avec $\omega_1 + \omega_2 = \omega_0$. Des diaphragmes permettent de fixer les directions \mathbf{u}_1 et \mathbf{u}_2 de ces deux faisceaux. Les deux détecteurs D_1 et D_2 enregistrent les arrivées des photons et permettent d'étudier leurs corrélations temporelles.

Nous allons nous concentrer sur l'aspect temporel du processus, et non sur l'aspect spatial. Pour simplifier, nous supposons donc que les trois états du champ qui apparaissent sur la Figure 2 sont des ondes planes infinies dans les deux directions transverses. La seule variable dont dépendent les modes concernés est alors la composante longitudinale du vecteur \mathbf{k} ou, ce qui revient au même, la fréquence ω . Le photon incident est alors décrit par un paquet d'ondes caractérisé dans l'espace des fréquences par une fonction réelle $c(\omega_0)$, centrée en ω_m^0 et de largeur $\Delta\omega_0 \ll \omega_m^0$. Le centre du paquet d'ondes incident arrive donc en O à l'instant $t = 0$ et défile en ce point pendant un temps de l'ordre de :

$$\Delta t \simeq \hbar/c\Delta k = \hbar/\Delta\omega_0 \quad (64)$$

Le paquet d'ondes à deux photons obtenu par conversion paramétrique est décrit par une expression analogue à (63), où nous utilisons maintenant les variables $\omega_{1,2} = c|\mathbf{k}_{1,2}|$; ce paquet d'ondes contient alors une certaine dépendance en ω_1 et ω_2 de $g(\omega_1, \omega_2)$.

$\alpha.$ *Signal de photo-détection double* $w_{II}(\mathbf{r}_1, t; \mathbf{r}_2, t + \tau)$

Calculons tout d'abord l'amplitude d'absorption des deux photons⁹, l'un à l'instant t par le détecteur D_1 situé en \mathbf{r}_1 , l'autre à l'instant $t + \tau$ par le détecteur D_2 situé en \mathbf{r}_2 :

$$\begin{aligned} \langle 0|E^{(+)}(\mathbf{r}_2, t + \tau)E^{(+)}(\mathbf{r}_1, t)|\psi_R\rangle &= \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \sum_{\omega_0} \sum_{\omega_1, \omega_2} c(\omega_0) \sqrt{\omega_1 \omega_2} g(\omega_1, \omega_2) \\ &\times e^{i[\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2 - \omega_2(t + \tau)]} e^{i[\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 - \omega_1 t]} \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_0) \end{aligned} \quad (65)$$

Dans cette équation, \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 sont les vecteurs d'onde des deux photons se propageant librement le long de \mathbf{u}_1 et \mathbf{u}_2 . Nous notons L_1 et L_2 les distances entre O et D_1 , O et D_2 , $T_1 = L_1/c$ et $T_2 = L_2/c$ les temps mis par les photons pour parcourir ces deux distances. On a :

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 &= \frac{\omega_1}{c} L_1 = \omega_1 T_1 \\ \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2 &= \frac{\omega_2}{c} L_2 = \omega_2 T_2 \end{aligned} \quad (66)$$

de sorte que (65) peut être ré-écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \langle 0|E^{(+)}(\mathbf{r}_2, t + \tau)E^{(+)}(\mathbf{r}_1, t)|\psi_R\rangle &= \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \sum_{\omega_0} \sum_{\omega_1, \omega_2} c(\omega_0) \sqrt{\omega_1 \omega_2} g(\omega_1, \omega_2) \\ &\times e^{i\omega_2[T_2 - t - \tau]} e^{i\omega_1[T_1 - t]} \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_0) \end{aligned} \quad (67)$$

Nous remplaçons maintenant les deux variables ω_1 et ω_2 par une seule variable $\delta\omega$ en posant :

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \frac{\omega_0}{2} + \delta\omega \\ \omega_2 &= \frac{\omega_0}{2} - \delta\omega \end{aligned} \quad (68)$$

La condition $\omega_1 + \omega_2 = \omega_0$ est alors automatiquement satisfaite, de sorte que la fonction δ apparaissant dans la deuxième ligne de (67) n'est plus nécessaire. La sommation sur ω_1 et ω_2 devient une sommation sur $\delta\omega$, et la fonction $g(\omega_1, \omega_2)$ est remplacée par une fonction $\tilde{g}(\delta\omega)$. Si l'on suppose pour simplifier $T_1 = T_2 = T$, on obtient finalement :

$$\begin{aligned} \langle 0|E^{(+)}(\mathbf{r}_2, t + \tau)E^{(+)}(\mathbf{r}_1, t)|\psi\rangle &= \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \sum_{\omega_0} c(\omega_0) e^{i\omega_0[T - t - \tau]/2} e^{i\omega_0[T - t]/2} \\ &\times \sum_{\delta\omega} \sqrt{\left(\frac{\omega_0}{2} + \delta\omega\right)\left(\frac{\omega_0}{2} - \delta\omega\right)} \tilde{g}(\delta\omega) e^{i\delta\omega \tau} \end{aligned} \quad (69)$$

$\beta.$ *Discussion physique*

La dépendance en τ du signal de photo-détection double est donnée par la somme sur $\delta\omega$ de la deuxième ligne de (69). C'est donc, si l'on passe à la limite

9. Le signal w_{II} est égal au carré du module de cette amplitude.

continue, la transformée de Fourier de $\sqrt{(\frac{\omega_0}{2} + \delta\omega)(\frac{\omega_0}{2} - \delta\omega)} \times \tilde{g}(\delta\omega)$. Le produit $\sqrt{(\frac{\omega_0}{2} + \delta\omega)(\frac{\omega_0}{2} - \delta\omega)}$ varie très lentement avec $\delta\omega$ et peut être considéré comme constant, ainsi que les densités d'états qui s'introduisent quand on remplace la somme discrète par une intégrale. Nous avons vu également plus haut (§ 5-a-β) que la variation de g en fonction de ω_1 et ω_2 , donc celle de $\tilde{g}(\delta\omega)$, est très lente tant qu'aucun état relais résonnant (ou quasi résonnant) n'intervient dans le processus de diffusion. La fonction de $\delta\omega$ dont il faut prendre la transformée de Fourier a donc une largeur qui est grande, une fraction de la fréquence optique. Il en découle que le signal de photo-détection double n'est différent de zéro que si les deux photo-détections sont séparées par un intervalle de temps de l'ordre de quelques périodes optiques. En d'autres termes, les deux photo-détections sont toujours quasi simultanées.

Considérons alors la somme sur ω_0 de la première ligne de (69). Nous allons voir que la dépendance en t du signal fait intervenir des échelles de temps beaucoup plus longues que celles caractérisant la variation avec τ du signal w_{II} . Remplaçons en effet τ par 0 dans le deuxième membre; on obtient, après passage à la limite continue :

$$\int d\omega_0 c(\omega_0) e^{i\omega_0(T-t)} \quad (70)$$

c'est-à-dire la transformée de Fourier du paquet d'ondes incident. Ce paquet d'ondes arrive en O à $t = 0$, et défile en ce point pendant un temps Δt qui est en général beaucoup plus long que le temps caractérisant la dépendance en τ du signal w_{II} . La relation (70) montre donc que les deux détecteurs donnent (presque simultanément) un signal à un instant t quelconque situé dans un intervalle de temps Δt centré autour de $t = T$; ce temps correspond à l'arrivée en D_1 et D_2 des photons générés en O à partir du paquet d'ondes incident. Mais, une fois qu'un photon est détecté par un détecteur, l'autre photon est détecté pratiquement au même instant par l'autre détecteur. Une telle corrélation temporelle ne serait pas prédite par un traitement semi-classique.

Ces résultats demeurent valables quand le processus de conversion paramétrique est produit, non pas par un seul photon incident décrit par un paquet d'ondes, mais par une excitation laser continue. Les deux faisceaux engendrés par le processus de conversion paramétrique contiennent alors une suite de paires de photons, qui apparaissent au même instant quand on les détecte; on parle alors de *photons jumeaux*.

De tels "faisceaux jumeaux" permettent d'exciter des transitions à deux photons bien plus efficacement que des faisceaux ordinaires. En effet, en l'absence d'état relais résonnant dans le processus d'absorption à deux photons, un argument identique à celui développé ci-dessus montre que les deux absorptions doivent être séparées par un intervalle de temps très court (les deux photons interagissent quasi-simultanément avec l'atome qui les absorbe). Les deux photons incidents doivent donc arriver au même instant sur l'atome, ce qui peut être le cas avec des faisceaux jumeaux (avec des faisceaux ordinaires, on ne pourrait observer que des absorptions à deux photons dues à des coïncidences accidentelles).

En pratique, la conversion paramétrique du rayonnement est souvent effectuée, non pas par un atome isolé, mais par les atomes ou les molécules d'un solide. Il est alors impératif de tenir compte de l'interférence entre les faisceaux issus des différents éléments du solide, et d'identifier les conditions dans lesquelles cette in-

terférence est constructive. Il faut en particulier prendre en compte l'indice optique du milieu dans lequel se propagent les faisceaux, ce qui conduit à une condition dite d'accord de phase. Cette question sort du cadre du présent complément, mais le lecteur intéressé pourra la trouver traitée dans un ouvrage d'optique quantique [63] [64].

Chapitre XXI

Intrication quantique, mesures, inégalités de Bell

A	Notion d'intrication, buts de ce chapitre	624
B	Etats intriqués d'un système de deux spins 1/2	626
B-1	Etat singulet, matrices densité réduites	627
B-2	Corrélations	628
C	Intrication entre systèmes physiques quelconques	629
C-1	Etats purs intriqués, notations	629
C-2	Présence (ou non) d'une intrication : décomposition de Schmidt	629
C-3	Caractérisation de l'intrication : rang de Schmidt	632
D	Mesure idéale et états intriqués	632
D-1	Schéma d'une mesure idéale (von Neumann)	632
D-2	Couplage avec l'environnement, décohérence ; les "états pointeurs"	636
D-3	Unicité du résultat de mesure	637
E	Expériences "quel chemin" : peut-on identifier le chemin suivi par le photon dans l'expérience des fentes d'Young ?	639
E-1	Intrication entre les états du photon et ceux de la plaque	640
E-2	Prédictions sur les mesures effectuées sur le photon	640
F	Intrication, non-localité, théorème de Bell	641
F-1	L'argument EPR	641
F-2	La réponse de Bohr, non-séparabilité	644
F-3	Inégalités de Bell	644

Nous abordons dans ce dernier chapitre une notion essentielle de la mécanique quantique, l'intrication. Ceci nous permettra de mettre en lumière toute une série de spécificités de la mécanique quantique qui sont sans équivalent en physique classique.

A. Notion d'intrication, buts de ce chapitre

Considérons deux systèmes physiques A et B d'espace des états respectifs \mathcal{E}_A et \mathcal{E}_B , ainsi que le système total $A+B$ qui les réunit ; son espace des états est le produit tensoriel $\mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B$. Si nous supposons que le système A est décrit par un état quantique normé $|\varphi_A\rangle$ appartenant à \mathcal{E}_A , le système B par un état quantique normé $|\chi_B\rangle$ appartenant à son espace des états \mathcal{E}_B , le ket $|\Phi\rangle$ décrivant le système total est alors le produit tensoriel :

$$|\Phi\rangle = |\varphi_A\rangle \otimes |\chi_B\rangle \tag{A-1}$$

Dans ce cas, chacun des trois systèmes physiques A , B , et $A + B$ est décrit de la même façon : par un vecteur d'état, c'est-à-dire de la façon la plus précise possible en mécanique quantique.

La situation est différente lorsque le vecteur d'état total n'est plus un produit. Notons $|\varphi_A\rangle, |\zeta_A\rangle, \dots$, des états quantiques orthonormés appartenant à l'espace des états \mathcal{E}_A du premier système, et $|\chi_B\rangle, |\xi_B\rangle$, des états orthonormés appartenant à l'espace des états \mathcal{E}_B du second. Nous pouvons alors construire d'autres produits que (A-1) pour l'état du système total :

$$|\Phi'\rangle = |\zeta_A\rangle \otimes |\xi_B\rangle \tag{A-2}$$

mais nous pouvons aussi, en vertu du principe de superposition, construire une combinaison linéaire quelconque $|\Psi\rangle$ de $|\Phi\rangle$ et $|\Phi'\rangle$ qui n'est pas un produit :

$$|\Psi\rangle = \alpha |\varphi_A\rangle \otimes |\chi_B\rangle + \beta |\zeta_A\rangle \otimes |\xi_B\rangle \tag{A-3}$$

Dans cette relation, les coefficients complexes α et β sont arbitraires et soumis à la seule condition de normalisation :

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{A-4}$$

Nous supposons cependant qu'aucun de ces coefficients n'est nul, afin que (A-3) ne se ramène pas à un simple produit :

$$\alpha\beta \neq 0 \tag{A-5}$$

Un état tel que (A-3), qui contient une superposition cohérente de deux (ou plus) composantes qui sont des produits, est appelé "état intriqué". La propriété générale associée à ces états est appelée "intrication quantique". Elle correspond au fait que l'état quantique de chaque sous-système est en quelque sorte conditionné par l'état de l'autre.

Au Complément E_{III}, nous avons introduit la notion d'opérateur densité, qui fournit une description d'un système physique plus générale que le vecteur d'état. Pour le système physique total $A+B$ dont le vecteur d'état est connu, son opérateur densité est simplement le projecteur sur $|\Psi\rangle$:

$$\rho_{A+B} = |\Psi\rangle \langle\Psi| \tag{A-6}$$

dont la trace est l'unité :

$$\text{Tr} \{ \rho_{A+B} \} = \langle\Psi | \Psi\rangle = 1 \tag{A-7}$$

Lorsqu'un système physique peut être décrit par un vecteur d'état, on dit qu'il est dans un "état pur" ; son opérateur densité satisfait à la relation :

$$[\rho_{A+B}]^2 = \rho_{A+B} \tag{A-8}$$

et donc à :

$$\text{Tr} \left\{ [\rho_{A+B}]^2 \right\} = 1 \tag{A-9}$$

Dans ces conditions, le système physique total peut être décrit au choix, soit par son vecteur d'état $|\Psi\rangle$, soit par l'opérateur densité ρ_{A+B} . Nous allons voir que ce n'est pas le cas des deux sous-systèmes A et B , pour lesquels c'est l'opérateur densité qu'il faut utiliser.

Supposons en effet que nous nous intéressions uniquement à des mesures effectuées sur le sous-système A . Nous avons vu au § 5.b du Complément E_{III} que, lorsque le système total est intriqué comme en (A-3), il n'existe en général pas de vecteur d'état appartenant à \mathcal{E}_A qui permette de calculer les probabilités de mesures effectuées uniquement sur A . Il faut nécessairement recourir à un opérateur densité ρ_A obtenu par trace partielle (prise sur l'espace des états \mathcal{E}_B du système non observé – nous rappellerons au § B-1 ci-dessous comment calculer les éléments de matrice d'une trace partielle) :

$$\rho_A = \text{Tr}_B \{ \rho_{A+B} \} \tag{A-10}$$

Comme (A-6), cet opérateur est de trace unité, hermitique et défini positif ; mais ce n'est pas le projecteur sur un seul vecteur d'état. Pour l'état intriqué (A-3), on a en effet :

$$\rho_A = |\alpha|^2 |\varphi_A\rangle \langle \varphi_A| + |\beta|^2 |\zeta_A\rangle \langle \zeta_A| \tag{A-11}$$

qui est la somme de deux projecteurs. Le sous-système A se trouve ainsi dans l'état $|\varphi_A\rangle$ avec une probabilité $|\alpha|^2$, et dans l'état $|\zeta_A\rangle$ avec une probabilité $|\beta|^2$: contrairement à celui de $A + B$, l'état quantique de A n'est donc pas connu avec certitude, mais seulement avec une certaine probabilité. L'opérateur densité ρ_A est alors qualifié de "mélange statistique" – l'idée étant que le calcul des prédictions des résultats de mesures effectuées sur A s'obtient par une moyenne sur les propriétés (non observées) de B . On a alors une inégalité :

$$\text{Tr} \left\{ [\rho_A]^2 \right\} \leq 1 \tag{A-12}$$

où l'égalité ne se produit que si l'un des deux coefficients α ou β est nul ; l'équivalent de la relation (A-9) n'est donc en général plus satisfaite par ρ_A . L'inégalité (A-12) traduit le fait que, l'état quantique de A n'étant connu que de façon statistique, la description quantique de A est moins précise que celle du système total $A + B$. Les considérations précédentes se généralisent immédiatement au cas où $|\Psi\rangle$ est la superposition, non pas de deux composantes comme en (A-3), mais de trois ou plus.

On se trouve alors dans une situation qui peut paraître assez surprenante, car elle n'a aucun équivalent en physique classique. En effet, une description classique parfaite du système total $A + B$ entraînerait immédiatement que chacun des deux sous-systèmes est, lui aussi, parfaitement décrit. C'est automatique, puisqu'une

spécification complète de l'état du système total n'est autre que la réunion des descriptions complètes des deux sous-systèmes; par exemple, une description classique parfaite du système solaire n'est autre que la donnée de toutes les positions et vitesses des planètes, satellites, et de toutes les particules constituantes. En mécanique quantique, il en va tout autrement : la description la plus précise possible du système total par un vecteur d'état (état pur) n'implique pas en général une description aussi précise des sous-systèmes. Cette différence change ainsi fondamentalement la relation habituelle entre les parties et le tout d'un système physique. Schrödinger, qui le premier a introduit les mots "intrication quantique" en 1935, commente ce nouveau concept dans les termes suivants : "Pour ma part, je n'appellerais pas cette propriété une des caractéristiques de la mécanique quantique mais plutôt sa caractéristique principale, celle qui nous force à adopter un changement total de nos lignes de pensée habituelles. Sous l'effet de l'interaction, les deux représentations [les états quantiques] se sont intriquées... Une autre façon de discuter cette situation très particulière est de dire : la meilleure connaissance possible d'un tout n'inclut pas nécessairement la meilleure connaissance possible de ses parties, même si elles sont totalement séparées et pourraient virtuellement être capables d'être elles aussi connues aussi bien que possible", c'est-à-dire avoir une représentation (vecteur d'état) à elles".

De façon générale, lorsque le vecteur d'état d'un système total n'est pas un produit, et donc qu'on se trouve en présence d'intrication quantique, les prédictions quantiques concernant les observations faites sur les sous-systèmes peuvent alors prendre un caractère inattendu. Le but de ce chapitre est de discuter un certain nombre d'effets physiques particuliers liés à l'intrication quantique. Dans le § B, nous donnons une introduction générale au sujet dans le cas simple de deux spins $1/2$ intriqués dans un état singulet. Puis, au § C, nous généralisons l'exemple précédent à des systèmes physiques quelconques, et étudions un certain nombre de propriétés des états quantiques intriqués. Le § D aborde ensuite la question des relations entre intrication et mesures quantiques, en particulier dans le cadre d'un schéma de mesure idéale proposé par von Neumann. Au § E, nous étudions une expérience où l'on chercherait à observer les franges d'interférence d'une particule traversant une plaque percée de deux fentes, mais aussi à déterminer simultanément par quelle fente elle est passée; si c'était possible, on arriverait à une contradiction. Cependant une opération de trace partielle sur un état intriqué de la particule et de la plaque permet de montrer la cohérence du formalisme quantique et d'illustrer un aspect de la complémentarité. Enfin, au § F, les relations entre intrication et non-localité quantique sont discutées dans le cadre de l'argument général de Einstein, Podolsky et Rosen, ainsi que du théorème de Bell.

B. Etats intriqués d'un système de deux spins $1/2$

Commençons par discuter un cas très simple, dont l'étude se révèle utile pour la suite de ce chapitre : celui où chacun des deux systèmes A et B est un spin $1/2$; chacun des espaces des états $\mathcal{E}_{A,B}$ est alors engendré par les deux états propres $|\pm\rangle$ de la composante du spin sur l'axe Oz . Nous supposons que ces deux spins sont intriqués dans un état singulet, tel que celui écrit dans la relation (B-22) du

Chapitre X :

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|A : +\rangle \otimes |B : -\rangle - |A : -\rangle \otimes |B : +\rangle \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|+, -\rangle - |-, +\rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{B-1})$$

(dans la seconde ligne, nous avons simplifié la notation en supposant que le premier indice dans le ket se réfère au spin A , le second au spin B).

B-1. Etat singulet, matrices densité réduites

Dans la base des 4 kets $|+, +\rangle$, $|+, -\rangle$, $|-, +\rangle$, $|-, -\rangle$ pris dans cet ordre, la matrice représentant l'opérateur densité ρ_{A+B} est alors :

$$(\rho_{A+B}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B-2})$$

On vérifie aisément par un produit de matrices que $(\rho_{A+B})^2 = (\rho_{A+B})$, et donc que la relation (A-9) est vérifiée : le système total est dans un état pur.

Comme indiqué dans le § 5-b du Complément E_{III}, la matrice représentant l'opérateur densité ρ_A s'obtient par trace partielle, c'est-à-dire en additionnant les éléments de matrice de (ρ_{A+B}) diagonaux vis-à-vis des nombres quantiques du second spin (en d'autres termes, on somme sur les états du spin non observé) :

$$\langle m_s | \rho_A | m'_s \rangle = \sum_{m''_s} \langle m_s, m''_s | \rho_{A+B} | m'_s, m''_s \rangle \quad (\text{B-3})$$

Ceci conduit ici à :

$$(\rho_A) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B-4})$$

On obtient alors :

$$(\rho_A)^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B-5})$$

et donc $\text{Tr} \left\{ (\rho_A)^2 \right\} = 1/2$; le spin A n'est donc pas dans un état pur. Par symétrie, on trouverait évidemment le même résultat pour (ρ_B) . On constate que, dans l'opération de trace partielle, tous les éléments non diagonaux (cohérences) de (B-2) ont complètement disparu : vu comme un système isolé, chacun des deux spins se trouve dans un état "totalement dépolarisé" où il a la même probabilité 1/2 de donner les résultats $+$ ou $-$ lors d'une mesure de la composante sur Oz de son spin (ou, de fait, de n'importe quelle composante de son spin). Au niveau de chaque spin individuel, le signe moins qui caractérise l'intrication du vecteur d'état (B-1) ne joue donc plus aucun rôle; en revanche, nous allons voir que cette intrication fait apparaître de fortes corrélations entre les résultats de mesure portant sur les deux spins.

B-2. Corrélations

Supposons maintenant que l'on mesure simultanément les deux spins, le premier selon une direction du plan xOz faisant un angle θ_A avec l'axe Oz , le second selon une direction de ce même plan faisant un angle θ_B avec Oz . Les résultats que nous allons obtenir seront importants pour la discussion du théorème de Bell au § F-3-a. Les relations (A-22) du Chapitre IV (avec l'angle φ nul) donnent les expressions vecteurs propres associés à ces mesures dans les espaces des états \mathcal{E}_A et \mathcal{E}_B :

$$\begin{aligned} |+\rangle_{\theta_{A,B}} &= \cos \frac{\theta_{A,B}}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta_{A,B}}{2} |-\rangle \\ |-\rangle_{\theta_{A,B}} &= -\sin \frac{\theta_{A,B}}{2} |+\rangle + \cos \frac{\theta_{A,B}}{2} |-\rangle \end{aligned} \quad (\text{B-6})$$

Dans l'espace des états des deux spins, le ket correspondant à un double résultat de mesure $+$ est donc :

$$\begin{aligned} |+\rangle_{\theta_A} \otimes |+\rangle_{\theta_B} &= \cos \frac{\theta_A}{2} \cos \frac{\theta_B}{2} |+, +\rangle + \cos \frac{\theta_A}{2} \sin \frac{\theta_B}{2} |+, -\rangle \\ &\quad + \sin \frac{\theta_A}{2} \cos \frac{\theta_B}{2} |-, +\rangle + \sin \frac{\theta_A}{2} \sin \frac{\theta_B}{2} |-, -\rangle \end{aligned} \quad (\text{B-7})$$

de sorte que l'amplitude de probabilité d'obtenir ce double résultat avec l'état singulet (B-1) s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | [|+\rangle_{\theta_A} \otimes |+\rangle_{\theta_B}] &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\cos \frac{\theta_A}{2} \sin \frac{\theta_B}{2} - \sin \frac{\theta_A}{2} \cos \frac{\theta_B}{2} \right] \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \frac{\theta_A - \theta_B}{2} \end{aligned} \quad (\text{B-8})$$

La probabilité du résultat $(+, +)$ pour les mesures des deux composantes le long des directions θ_A et θ_B est donc :

$$\mathcal{P}_{++}(\theta_A, \theta_B) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_A - \theta_B}{2} \quad (\text{B-9})$$

On peut recommencer le calcul pour les trois autres couples de résultats possibles, $(+, -)$, $(-, +)$ et $(-, -)$. Cela ne présente aucune difficulté particulière, mais il est plus simple de remarquer que le changement de θ_A en $\theta_A + \pi$ permet d'intervertir les deux kets propres de (B-6), et donc les résultats $+$ et $-$ pour le premier spin A ; la même opération est possible pour le second spin B . Il suffit d'effectuer ces substitutions dans (B-9) pour obtenir les probabilités des 4 résultats possibles sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{++}(\theta_A, \theta_B) &= \mathcal{P}_{--}(\theta_A, \theta_B) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_A - \theta_B}{2} \\ \mathcal{P}_{+-}(\theta_A, \theta_B) &= \mathcal{P}_{-+}(\theta_A, \theta_B) = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\theta_A - \theta_B}{2} \end{aligned} \quad (\text{B-10})$$

Nous voyons donc que de fortes corrélations entre les résultats apparaissent lorsque les deux spins sont mesurés¹. Ces corrélations sont la conséquence directe de l'intrication présente dans le vecteur d'état singulet (B-1).

1. Il n'y a en général pas factorisation des probabilités. On vérifie en effet à partir de (B-10) que $\mathcal{P}_{++}/\mathcal{P}_{-+}$ est différent de $\mathcal{P}_{+-}/\mathcal{P}_{--}$. Ceci indique que le rapport entre les probabilités d'obtenir avec le premier spin un résultat $+$ et un résultat $-$ dépend de l'état du second spin, donc des corrélations.

C. Intrication entre systèmes physiques quelconques

La notion d'intrication n'est bien sûr par limitée à l'état singulet de deux spins $1/2$. Pour deux systèmes physiques quelconques, nous étudions maintenant comment caractériser la présence d'une intrication lorsque le système total est dans un état pur.

C-1. Etats purs intriqués, notations

Considérons par exemple deux systèmes quantiques A et B , d'espaces des états respectifs \mathcal{E}_A (de dimension P) et \mathcal{E}_B (de dimension Q). Le vecteur d'état normé $|\Psi\rangle$ décrivant le système total $A + B$ appartient au produit tensoriel $\mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B$, de dimension PQ . Certains états $|\Psi\rangle$ peuvent s'écrire sous la forme d'un produit :

$$|\Psi\rangle = |\varphi_A\rangle \otimes |\varphi_B\rangle \quad (\text{C-1})$$

où $|\varphi_A\rangle$ et $|\varphi_B\rangle$ sont des kets normés quelconques de \mathcal{E}_A et \mathcal{E}_B respectivement. Dans un tel cas, on dit que les deux sous-systèmes physiques A et B ne sont pas intriqués ; chacun d'entre eux peut être décrit par un vecteur d'état (cas pur), tout comme le système total. En revanche, la majorité des états $|\Psi\rangle$ ne peuvent pas être factorisés de la sorte, et s'écrivent donc nécessairement comme une somme de produits (l'état singulet écrit plus haut en est un exemple) ; les deux sous-systèmes A et B sont alors intriqués.

Il n'est pas toujours simple de voir sur l'expression d'un vecteur d'état quelconque $|\Psi'\rangle$ s'il peut effectivement s'écrire comme un produit tensoriel. Ce ket a en général $P \times Q$ composantes, et s'écrit :

$$|\Psi'\rangle = \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^Q c_{p,q} |\chi_A^p\rangle \otimes |\xi_B^q\rangle \quad (\text{C-2})$$

où les $|\chi_A^p\rangle$ ainsi que les $|\xi_B^q\rangle$ sont orthonormés. Mais d'autre part, si nous développons dans le produit (C-1) les kets $|\varphi_A\rangle$ et $|\varphi_B\rangle$ sur les kets $|\chi_A^p\rangle$ et $|\xi_B^q\rangle$ selon :

$$|\varphi_A\rangle = \sum_{p=1}^P x_p |\chi_A^p\rangle \quad \text{et} \quad |\varphi_B\rangle = \sum_{q=1}^Q y_q |\xi_B^q\rangle \quad (\text{C-3})$$

nous obtenons :

$$|\Psi\rangle = \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^Q x_p y_q |\chi_A^p\rangle \otimes |\xi_B^q\rangle \quad (\text{C-4})$$

Il n'est pas du tout évident, au simple vu des coefficients $c_{p,q}$ de $|\Psi'\rangle$, de savoir si on peut les factoriser pour arriver à une expression de ce type et à un produit comme en (C-1). Nous présentons dans ce qui suit une méthode systématique qui permet de voir si une telle factorisation est possible, et si oui de l'effectuer.

C-2. Présence (ou non) d'une intrication : décomposition de Schmidt

On peut montrer (la démonstration est donnée plus bas) que tout état pur $|\Psi\rangle$ décrivant l'ensemble des deux systèmes physiques A et B peut s'écrire sous la

forme :

$$|\Psi\rangle = \sum_i \sqrt{q_i} |u_i, w_i\rangle \tag{C-5}$$

où les $|u_i\rangle$ constituent un ensemble de vecteurs orthonormés dans l'espace des états du premier système, et les $|w_i\rangle$ un autre ensemble de vecteurs orthonormés dans le second espace des états. Cette expression constitue la décomposition de Schmidt d'un état pur, également appelée "décomposition bi-orthonormale".

Que l'état du système total $|\Psi\rangle$ soit intriqué ou non, il lui correspond toujours un opérateur densité, écrit en (A-6). Chacun des sous-systèmes peut être décrit par les opérateurs densité obtenus par traces partielles :

$$\rho_A = \text{Tr}_B \{ \rho_{A+B} \} \quad ; \quad \rho_B = \text{Tr}_A \{ \rho_{A+B} \} \tag{C-6}$$

Le calcul à partir de (C-5) donne alors deux expressions symétriques :

$$\rho_A = \sum_i q_i |u_i\rangle \langle u_i| \tag{C-7}$$

et :

$$\rho_B = \sum_i q_i |w_i\rangle \langle w_i| \tag{C-8}$$

Nous constatons donc que, lorsque le système total est dans un état pur, les deux opérateurs densité partiels ont toujours les mêmes valeurs propres². Dans le cas particulier où elles sont toutes nulles sauf une, chacun des deux sous-systèmes est dans un état pur, et l'état $|\Psi\rangle$ se factorise. Aucune intrication n'est alors présente. Mais, en général, plusieurs des valeurs propres sont non nulles, et on voit immédiatement que $(\rho_A)^2$ n'est pas égal à ρ_A , et de même pour ρ_B ; l'état pur $|\Psi\rangle$ est alors intriqué.

Démonstration de la relation (C-5) :

Les deux opérateurs ρ_A et ρ_B sont hermitiques, non négatifs, et de trace unité. Leurs matrices peuvent donc être diagonalisées de façon à faire apparaître leurs valeurs propres réelles comprises entre 0 et 1. Appelons $|u_i\rangle$ les vecteurs propres normés de ρ_A (l'indice i prend P valeurs différentes, où P est la dimension de l'espace des états du sous-système A) et q_i les valeurs propres correspondantes, toutes positives ou nulles (mais pas nécessairement distinctes) ; de même les vecteurs propres de ρ_B sont notés $|v_l\rangle$ (où l prend Q valeurs différentes, Q étant la dimension de l'espace des états du second sous-système), et les valeurs propres correspondantes r_l . Les deux opérateurs densité partiels se décomposent selon :

$$\rho_A = \sum_{i=1}^P q_i |u_i\rangle \langle u_i| \quad \text{et} \quad \rho_B = \sum_{l=1}^Q r_l |v_l\rangle \langle v_l| \tag{C-9}$$

avec $0 \leq q_i, r_l \leq 1$.

2. Ce n'est cependant pas nécessairement le cas si le système total est décrit par un mélange statistique au lieu d'un état pur. Pour s'en convaincre, il suffit de supposer que ρ_{A+B} est égal à un produit tensoriel $\rho_A \otimes \rho_B$, où ρ_A et ρ_B sont quelconques et peuvent donc avoir des valeurs propres différentes.

Il est alors possible de décomposer l'état $|\Psi\rangle$ sur la base des kets produits tensoriels $\{|A : u_i\rangle \otimes |B : v_l\rangle\}$, que nous notons pour simplifier $\{|u_i, v_l\rangle\}$ en supposant que le premier ket représente un état de A et le second un état de B ; si les $c_{i,l}$ sont les composantes de $|\Psi\rangle$ dans cette base, nous obtenons :

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^P \sum_{l=1}^Q c_{i,l} |u_i, v_l\rangle \quad (\text{C-10})$$

Introduisons maintenant le ket $|\bar{w}_i\rangle$, appartenant à l'espace des états \mathcal{E}_B (ce ket n'est pas nécessairement normé), par :

$$|\bar{w}_i\rangle = \sum_{l=1}^Q c_{i,l} |v_l\rangle \quad (\text{C-11})$$

Le développement (C-10) de $|\Psi\rangle$ se simplifie alors en :

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^P |u_i, \bar{w}_i\rangle \quad (\text{C-12})$$

D'autre part, les éléments de matrice de la trace partielle ρ_A sont :

$$\langle u_i | \rho_A | u_j \rangle = \sum_m \langle u_i, v_m | \Psi \rangle \langle \Psi | u_j, v_m \rangle \quad (\text{C-13})$$

Mais l'expression (C-12) de $|\Psi\rangle$ implique que :

$$|\Psi\rangle \langle \Psi| = \sum_{i',j'} |u_{i'}, \bar{w}_{i'}\rangle \langle u_{j'}, \bar{w}_{j'}| \quad (\text{C-14})$$

Lorsque ce résultat est inséré dans (C-13), seuls subsistent les termes $i' = i$ et $j' = j$, de sorte que :

$$\langle u_i | \rho_A | u_j \rangle = \sum_m \langle v_m | \bar{w}_i \rangle \langle \bar{w}_j | v_m \rangle = \langle \bar{w}_j | \bar{w}_i \rangle \quad (\text{C-15})$$

soit :

$$\rho_A = \sum_{i,j} |u_i\rangle \langle u_i | \rho_A | u_j \rangle \langle u_j| = \sum_{i,j} |u_i\rangle \langle u_j| \times \langle \bar{w}_j | \bar{w}_i \rangle \quad (\text{C-16})$$

Cependant, par construction de la base $\{|u_i\rangle\}$ que nous avons utilisée, ρ_A est diagonal et donné par l'expression (C-9); la comparaison avec (C-16) montre que l'on a nécessairement :

$$\langle \bar{w}_j | \bar{w}_i \rangle = \delta_{i,j} \times q_i \quad (\text{C-17})$$

Lorsque les valeurs propres q_i sont non nulles, cette relation indique qu'on peut définir un ensemble de vecteurs orthonormés $|w_i\rangle$ de l'espace des états du système B par :

$$|w_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{q_i}} |\bar{w}_i\rangle \quad (\text{C-18})$$

Pour toutes les valeurs de l'indice i associées à des valeurs propres q_i nulles, la même relation indique que les kets $|\bar{w}_i\rangle$ sont nuls.

Enfin, lorsqu'on remplace dans (C-12) les $|\bar{w}_i\rangle$ par $\sqrt{q_i} |w_i\rangle$, on obtient l'égalité (C-5), qui est ainsi démontrée; les relations (C-7) et (C-8) en sont alors des conséquences directes.

C-3. Caractérisation de l'intrication : rang de Schmidt

Le nombre de valeurs propres q_i différentes de zéro, soit le nombre de termes non nuls dans (C-5), est appelé le "rang de Schmidt" de $|\Psi\rangle$ et noté R . Si $R = 1$, on voit immédiatement que l'état du système total n'est pas intriqué, les deux sous-systèmes se trouvant donc dans des états purs. Si $R = 2$, on tombe sur l'exemple étudié au § B où les deux sous-systèmes sont intriqués, si $R = 3$ on obtient une intrication plus compliquée, etc. Nous obtenons ainsi un critère qui permet de savoir si un ket général (C-2) est intriqué ou non : il suffit de calculer un opérateur densité partiel d'un des sous-systèmes et le nombre de ses valeurs propres non nulles (par commodité, on choisira évidemment le sous-système dont la dimension de l'espace des états est la plus petite) ; si ce nombre est 1, le vecteur propre associé à la valeur propre non nulle donne immédiatement un des facteurs de la décomposition, l'autre en découlant immédiatement. En revanche, si ce nombre est plus grand que 1, la décomposition en un seul produit tensoriel n'est pas possible.

L'intrication est donc en quelque sorte partagée de façon symétrique entre A et B ; il n'est par exemple pas possible qu'un des deux sous-systèmes soit dans un état pur et l'autre dans un mélange statistique. Le rang R est inférieur ou égal à la plus petite des dimensions P et Q des espaces des états de A et B ; il faut donc que les deux sous-systèmes aient des espaces des états de dimensions suffisantes si l'on veut obtenir une intrication de rang élevé entre eux.

Remarque :

Si toutes les valeurs propres q_i de ρ_A (et de ρ_B) sont distinctes, la décomposition de Schmidt est unique. En effet, les décompositions (C-9) et (C-8) de ρ_B sur les projecteurs sur ses vecteurs propres coïncident alors nécessairement ; la série des vecteurs propres $|w_i\rangle$ coïncide donc avec celles des $|v_i\rangle$. Les vecteurs propres des opérateurs densité partiels donnent alors directement la décomposition de Schmidt unique. En revanche, lorsque certaines valeurs propres q_i sont dégénérées, ce n'est plus le cas. Par exemple, pour l'état singulet (B-1), nous avons vu que les deux matrices densité partielles ont deux valeurs propres égales à $1/2$; cet état singulet décomposé en (B-1) sur des produits de vecteurs propres des composantes du spin le long de l'axe Oz s'écrit de la même façon avec les vecteurs propres des composantes de spin le long de n'importe quelle direction arbitraire. Il lui correspond donc une infinité de décompositions de Schmidt possibles.

D. Mesure idéale et états intriqués

L'intrication joue également un rôle essentiel dans tout processus de mesure quantique, car elle apparaît en général au cours de l'interaction entre le système mesuré S et l'appareil de mesure M . De plus, comme nous allons le voir, elle se propage plus loin, et met également en jeu l'environnement de l'appareil de mesure.

D-1. Schéma d'une mesure idéale (von Neumann)

Le modèle de von Neumann de la mesure quantique fournit un cadre général permettant de décrire un processus de mesure quantique en termes d'intrication apparaissant (ou disparaissant) dans le vecteur d'état décrivant le système total

$S + M$. Initialement, les deux systèmes S et M sont décrits par un état factorisé $|\Psi_0\rangle$ mais, comme ils interagissent pendant un certain temps, ils atteignent un état intriqué $|\Psi'\rangle$; on suppose qu'ils n'interagissent plus ensuite, par exemple parce que la distance qui les sépare devient grande.

Dans l'espace des états de S , de dimension N_S , la quantité physique mesurée sur S est décrite par un opérateur O_A dont les vecteurs propres normés sont les kets $|a_k\rangle$ avec les valeurs propres a_k (que nous supposons non dégénérées pour simplifier l'écriture) :

$$O_A |a_k\rangle = a_k |a_k\rangle \tag{D-1}$$

Initialement, l'état $|\varphi_0\rangle$ de S est une combinaison linéaire quelconque des $|a_k\rangle$:

$$|\varphi_0\rangle = \sum_{k=1}^{N_S} c_k |a_k\rangle \tag{D-2}$$

avec des coefficients complexes c_k ayant pour seule contrainte que la somme des carrés de leurs modules soit égale à 1 (condition de normalisation). Pour l'appareil de mesure M , nous supposons qu'initialement il est toujours dans le même état quantique normé $|\Phi_0\rangle$. L'état initial du système total est alors :

$$|\Psi_0\rangle = |\varphi_0\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \tag{D-3}$$

D-1-a. Processus de base

Commençons par le cas particulier où le résultat de mesure est certain et où, initialement, le système S se trouve dans l'un des états propres associés à la mesure : $|\varphi_0\rangle = |a_k\rangle$. Dans ce cas :

$$|\Psi_0\rangle = |a_k\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \tag{D-4}$$

Après la mesure, S reste alors dans le même état $|a_k\rangle$, mais l'appareil de mesure atteint un état $|\Phi'_k\rangle$ qui est différent de $|\Phi_0\rangle$ et dépend de k : c'est une condition nécessaire pour que le résultat soit accessible expérimentalement. En effet, la position du "pointeur" utilisé pour la lecture du résultat (l'aiguille de mesure macroscopique, l'inscription du résultat dans une mémoire, etc.) doit évidemment dépendre de k pour permettre l'acquisition de ce résultat. Il est d'ailleurs naturel de supposer que les différents états $|\Phi'_k\rangle$ sont orthogonaux entre eux, puisque le pointeur met nécessairement en jeu un très grand nombre d'atomes qui atteignent un état différent pour permettre la lecture par un observateur macroscopique. L'effet de la mesure sur le système total est donc résumé dans ce cas simple par :

$$|\Psi_0\rangle = |a_k\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \implies |\Psi'\rangle = |a_k\rangle \otimes |\Phi'_k\rangle \tag{D-5}$$

où $|\Phi'_k\rangle$ est un état normé de M . A ce stade, aucune corrélation ou intrication n'est donc apparue entre l'appareil de mesure et le système mesuré; ceci correspond à la situation simple où le résultat de la mesure est certain.

Dans le cas général, l'état initial du système S est une superposition d'états propres $|a_k\rangle$, comme écrit en (D-2). L'état qui remplace dans ce cas (D-4) est la combinaison linéaire avec les mêmes coefficients :

$$|\Psi_0\rangle = \sum_k c_k |a_k\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \tag{D-6}$$

La linéarité de l'équation de Schrödinger entraîne alors que :

$$|\Psi_0\rangle \implies |\Psi'\rangle = \sum_k c_k |a_k\rangle \otimes |\Phi'_k\rangle \tag{D-7}$$

qui est maintenant un état où l'appareil de mesure est intriqué avec le système mesuré S . Les états de S et M sont donc fortement corrélés : si la position du "pointeur" est celle associée à l'un des vecteurs d'états $|\Phi'_k\rangle$, l'état de S est décrit par le ket $|a_k\rangle$ associé à une valeur propre précise de O_A .

Après la mesure, on ne peut plus attribuer un vecteur d'état (état pur) au système S , mais seulement un opérateur densité obtenu par trace partielle. Comme les $|\Phi'_k\rangle$ sont mutuellement orthogonaux et normés, cet opérateur densité est donné par :

$$\rho'_S = \text{Tr}_M \{ |\Psi'\rangle \langle \Psi'| \} = \sum_k |c_k|^2 |a_k\rangle \langle a_k| \tag{D-8}$$

Cette relation paraît très naturelle : elle nous dit que le système mesuré a une probabilité $|c_k|^2$ de se trouver dans chacun des états $|\varphi_k\rangle$ associés aux résultats de mesure a_k , ce qui correspond bien à la règle des probabilités habituelles de Born. C'est donc une formule très utile qui résume de façon simple un certain nombre de caractéristiques du postulat de la mesure en mécanique quantique. Cependant, tous les résultats possibles continuent à être présents dans la trace partielle, étant considérés comme également possibles après la mesure. Rien n'indique à ce stade qu'un seul résultat est véritablement observé lors d'une réalisation donnée de l'expérience, ni qu'il est possible d'interpréter le carré des coefficients $|c_k|$ comme des probabilités classiques associées à des observations mutuellement exclusives. L'évolution prédite par l'équation de Schrödinger ne peut, à elle seule, expliquer l'unicité des résultats observés à l'échelle macroscopique. C'est la raison pour laquelle von Neumann a introduit le postulat de réduction du vecteur d'état (également appelé "réduction du paquet d'ondes", cf. Chapitre III, § B-3-c) ; nous reviendrons sur ce point plus en détail au § D-3.

D-1-b. Dynamique du processus d'intrication

Un hamiltonien simple d'interaction entre les systèmes S et M permet de rendre compte de l'apparition d'intrication entre ces systèmes, et de conduire aux relations (D-5) ou (D-7). Par exemple, nous pouvons supposer que leur hamiltonien d'interaction H_{int} s'écrit :

$$H_{int} = g O_A P_M \tag{D-9}$$

où O_A est l'opérateur (agissant sur S seulement) déjà introduit plus haut, P_M un opérateur agissant sur M seulement, et enfin g une constante de couplage. Nous supposons également que, dans l'espace des états de M , l'opérateur P_M possède un opérateur conjugué X_M :

$$[X_M, P_M] = i\hbar \tag{D-10}$$

Cette relation de commutation signifie que P_M est le générateur des opérateurs de translation par rapport à X_M ; l'action de son exponentielle sur un vecteur propre quelconque $|x_M\rangle$ de X_M :

$$X_M |x_M\rangle = x_M |x_M\rangle \tag{D-11}$$

induit une translation de la valeur propre x_M :

$$e^{-i\Delta x P_M/\hbar} |x_M\rangle = |x_M + \Delta x\rangle \quad (\text{D-12})$$

où Δx est un nombre réel quelconque – cf. relation (13) du Complément E_{II}.

Supposons maintenant que $|\Phi_0\rangle$ (état de l'appareil de mesure avant la mesure) soit un état propre normé de X_M de valeur propre x_0 , et ignorons³ toute autre source d'évolution du système total autre que l'interaction entre S et M . L'opérateur d'évolution entre le temps $t = 0$ avant la mesure et le temps $t = \tau$ où cesse l'interaction est :

$$U(\tau, 0) = e^{-ig\tau O_A P_M/\hbar} \quad (\text{D-13})$$

Son application au ket (D-4) donne alors :

$$U(\tau, 0) |a_k\rangle \otimes |\Phi_0(x_0)\rangle = |a_k\rangle \otimes |\Phi_0(x_0 + g\tau a_k)\rangle \quad (\text{D-14})$$

où les variables entre parenthèses dans les états de l'appareil de mesure⁴ désignent les valeurs propres de X_M . Ainsi, les états $|\Phi'_k\rangle$ introduits dans (D-5) sont-ils les kets :

$$|\Phi'_k\rangle = |\Phi(x_0 + g\tau a_k)\rangle \quad (\text{D-15})$$

Ces relations montrent que, pour l'appareil de mesure M , la valeur propre de X a été traduite d'une quantité $g\tau a_k$ qui dépend de la valeur propre a_k de S . L'observable X_M joue donc le rôle de la position d'un "pointeur" de l'appareil de mesure (aiguille de mesure), qui indique le résultat de mesure après interaction entre les deux systèmes. Quant à l'observable O_A , c'est celle du système S qui est mesurée par la position de ce pointeur.

Dans ces conditions, si l'état initial est une superposition cohérente comme en (D-6), l'état après interaction (D-7) s'écrit :

$$|\Psi'\rangle = \sum_k c_k |a_k\rangle \otimes |\Phi(x_0 + g\tau a_k)\rangle \quad (\text{D-16})$$

qui est une décomposition bi-orthogonale du type de celle obtenue au § C-2. Si, initialement, le système S n'est pas dans un état propre de O_A , l'interaction avec l'appareil de mesure change son état en un mélange statistique (D-8). Inversement, s'il est initialement dans un état propre de O_A , il reste dans le même état propre après mesure : l'opération ne change alors pas son état. On dit alors que la mesure est une "mesure quantique non destructive" (en anglais "*quantum non demolition*" measurement, ou QND).

3. Pour éviter cette hypothèse, le calcul pourrait être mené dans le point de vue d'interaction (exercice 15 du Complément L_{III}) par rapport à la somme des évolutions propres de S et M ; cela compliquerait un peu les résultats. Toutefois, comme nous mettons ici l'accent plutôt sur la dynamique introduite par leur couplage mutuel, pour simplifier les calculs nous supposons que ces évolutions propres ont un effet négligeable pendant la durée de l'interaction τ .

4. Inutile de dire qu'un appareil de mesure est macroscopique et possède bien d'autres degrés de liberté que la seule position du pointeur. Pour simplifier, nous n'introduisons pas ces degrés de liberté dans les notations.

D-2. Couplage avec l'environnement, décohérence ; les "états pointeurs"

Examinons maintenant dans quelles conditions le processus d'interaction et d'intrication que nous avons envisagé constitue une bonne mesure. Une première condition évidente à satisfaire est que les états $|\Phi'_k\rangle$ de l'appareil de mesure doivent garder l'information sur le résultat de la mesure d'une façon robuste, et ne pas la détruire immédiatement sous l'effet de l'évolution propre de M . Cette condition est remplie si X_M est une constante du mouvement de M , en d'autres termes si X_M commute avec l'hamiltonien propre H_M de M . De plus, l'appareil de mesure ne peut rester totalement isolé de son environnement, y compris à un niveau microscopique. En effet, de par sa fonction même, l'appareil doit être capable d'interagir et de se corrélérer avec un système d'enregistrement du résultat, voire même avec l'expérimentateur lorsque ce dernier prend connaissance du résultat de mesure ; c'est donc par définition un appareil "ouvert", susceptible d'interagir avec l'extérieur. Qu'il soit totalement isolé demanderait d'ailleurs qu'aucun de ses atomes, de ses électrons, etc., n'interagisse avec aucune particule de l'environnement et ne s'y corrèle d'une façon ou d'une autre, ce qui est évidemment impossible à réaliser pour un appareil macroscopique.

Il se produit donc, en ce qui concerne le couplage entre M et l'environnement E , un phénomène d'intrication qui rappelle celui que nous avons déjà discuté pour S et M . Nous devons donc déterminer quelle est la base de l'espace des états de M qui, dans l'état intriqué de $M + E$, conduit à un développement bi-orthogonal semblable à (D-16). Le calcul de l'opérateur densité partiel de M est du même type que celui qui nous a conduits à (D-8) pour l'intrication entre S et M : c'est dans la base de ce développement bi-orthogonal que l'opérateur densité partiel de M (qui remplace S) reste diagonal ; si l'on change de base, sa matrice densité acquiert en général des éléments non diagonaux. De plus, l'intrication continue à se propager de plus en plus loin dans l'environnement, de sorte qu'il est nécessaire que la base pertinente de M reste constante au cours du temps. Il faut donc déterminer quelle est cette base privilégiée.

Suivant les circonstances, le couplage entre un appareil de mesure et son environnement peut prendre des formes diverses et, en général, complexes à cause du grand nombre de degrés de liberté mis en jeu ; plusieurs constantes de temps interviennent. Différents modèles ont été développés pour rendre compte de ce couplage et de la dynamique qu'il produit ; nous n'entrerons pas dans leur détail. Une remarque générale est que la mesure met en jeu toute une chaîne d'amplification entre S et le pointeur macroscopique, chaîne qui peut être constituée d'objets mésoscopiques ou macroscopiques sensibles à l'environnement. L'intrication progresse tout au long de cette chaîne par des interactions qui ont un caractère local : les potentiels d'interaction sont diagonaux en représentation position, et leur portée est microscopique. Ils ne peuvent donc coupler entre eux des états quantiques correspondant à des positions macroscopiquement différentes des objets en question. Il s'ensuit que les branches du vecteur d'état correspondant à des positions spatiales différentes se propagent de façon indépendante. Ainsi le couplage avec l'environnement tend-il à privilégier la base des états où les positions des différents éléments de l'appareil de mesure, et bien sûr en particulier son pointeur, occupent des positions spatiales bien définies. La base privilégiée correspondante dans l'espace des états de l'appareil de mesure M est dite base des "états pointeurs" ("*pointer states*" en anglais), où sa ma-

trice densité reste diagonale au cours du temps. C'est dans cette base uniquement, définie par des critères de localisation du pointeur, que l'intrication avec E tend à détruire les cohérences (éléments non diagonaux de la matrice densité), sans modifier les éléments diagonaux (c'est-à-dire les positions des particules du pointeur).

En résumé, nous voyons ainsi apparaître plusieurs conditions nécessaires pour qu'un dispositif puisse être considéré comme un appareil de mesure satisfaisant pour donner accès à une grandeur physique de S ; il faut évidemment que le couplage entre S et M soit approprié pour transférer la bonne information de l'un à l'autre; il faut également que cette information transférée reste ensuite stable dans le temps vis-à-vis de l'évolution propre de M , ainsi que du couplage entre M et E . Bien sûr, il ne s'agit là que de conditions nécessaires : en pratique, un bon appareil de mesure doit être conçu en tenant compte de bien d'autres impératifs, par exemple une bonne sensibilité ou une minimisation de l'influence des perturbations extérieures inévitables.

D-3. Unicité du résultat de mesure

Nous avons déjà remarqué plus haut que, dans la dynamique associée à l'équation de Schrödinger, rien ne peut expliquer l'unicité des résultats observés à l'échelle macroscopique. Rien de surprenant à cela puisque (D-8) n'est qu'une conséquence directe de l'équation de Schrödinger, qui est incapable à elle seule de faire cesser la progression sans fin de la "chaîne de Von Neumann", comme nous le discutons maintenant.

D-3-a. Chaîne infinie de von Neumann

Reprenons le schéma de mesure idéale du § D-1. Après mesure, l'état de $S + M$ est l'état intriqué (D-7), superposition de composantes associées à tous les résultats possibles de mesure. On pourrait alors se demander si, en utilisant un second appareil de mesure M_2 pour observer M , on ne pourrait pas résoudre cette superposition et obtenir un résultat unique. Mais, en fait, le même processus d'intrication qu'entre S et M se reproduit alors et, après la seconde mesure, on obtient un état final :

$$|\Psi''\rangle = \sum_k c_k |a_k\rangle \otimes |\Phi'_k\rangle \otimes |\Xi'_k\rangle \quad (\text{D-17})$$

où les kets $|\Xi'_k\rangle$ désignent les états du second appareil de mesure M_2 , orthogonaux entre eux pour différentes valeurs de k . Bien évidemment, ajouter un troisième appareil de mesure M_3 ne fera que continuer plus loin la progression de l'intrication, chaque appareil de mesure jouant le rôle de l'environnement pour l'appareil précédent. Cette chaîne d'appareils de mesure peut continuer à l'infini, sans qu'à aucun niveau ne soit résolue la superposition et qu'émerge l'unicité du résultat de mesure; elle porte le nom de chaîne de von Neumann (et le problème logique ainsi posé porte le nom de "régression infinie de von Neumann").

Le célèbre "paradoxe du chat de Schrödinger" met en jeu une situation du même type : ici, le système S est supposé être un noyau radioactif dans une superposition de deux états, $|a_1\rangle$ où le noyau est resté excité, et $|a_2\rangle$ où il s'est désintégré et a émis une particule. Les kets $|\Phi_k\rangle$, $|\Xi_k\rangle$, etc. désignent les états d'un appareil de mesure qui peut détecter cette particule, et alors déclencher un système mécanique qui tue un chat en cas de détection; le dernier de ces kets $|Z\rangle$ caractérise donc le

chat, qui peut être dans un état $|Z_1\rangle$ où le chat reste vivant et dans un état $|Z_2\rangle$ où il est mort. Schrödinger met en avant l'absurdité d'une description physique d'un système comprenant un chat, où ce dernier peut se trouver à la fois dans un état vivant et dans un état mort.

Ainsi, l'unicité des résultats de mesure n'émerge pas de l'équation de Schrödinger ; elle prédit que le pointeur d'un appareil de mesure, et donc tout objet macroscopique, peuvent atteindre des superpositions d'états situés en des points éloignés de l'espace. La linéarité de l'équation de Schrödinger fait que rien ne peut empêcher les différentes composantes du vecteur d'état de se propager de plus en plus loin, sans que cette chaîne infinie d'intrications ne puisse jamais se résoudre en une seule de ses composantes. C'est précisément pour résoudre ce problème que von Neumann a introduit un postulat spécifique : le postulat de réduction du vecteur d'état (Chapitre III, § B-3-c) qui "impose à la main" l'unicité du résultat de mesure.

D-3-b. Postulat de réduction du vecteur d'état

Le postulat de réduction du vecteur d'état est également appelé "postulat de projection", ou encore "postulat de réduction du paquet d'ondes" (en anglais, on utilise souvent le mot "*collapse*"). Comme nous l'avons vu au Chapitre III (§ B.3.c), ce postulat spécifie qu'il faut supprimer, une fois que la mesure est effectuée, les sommations de (D-7), (D-8) et (D-17) : parmi tous les termes, on ne retient que la composante $k = m$ correspondant au résultat de mesure effectivement observé. Le vecteur d'état après la mesure redevient alors un produit, d'où l'intrication a disparu ; S est à nouveau dans un état pur. Ainsi, l'intrication initialement créée par le processus de mesure disparaît une fois le résultat enregistré.

Ce postulat, pour efficace qu'il soit, présente toutefois des difficultés d'interprétation. Son utilisation conduit en effet à considérer que le vecteur d'état peut évoluer sous l'influence de deux processus différents : une évolution "normale", continue, régie par l'équation différentielle de Schrödinger ; lors d'une mesure, une évolution soudaine, discontinue, régie par le postulat de réduction de von Neumann. Bien sûr, cette dualité introduit immédiatement la question de la limite entre les deux évolutions : à partir de quel moment exact faut-il considérer que la mesure a été effectuée ? En d'autres termes, jusqu'où se propage la superposition cohérente (D-17) ? Quels processus physiques constituent-ils une mesure, par opposition à ceux qui donnent lieu à une évolution continue de Schrödinger ? La difficulté qui en résulte est la motivation qui a poussé à introduire différentes interprétations de la mécanique quantique. Par exemple, il existe des interprétations dites "non standard" où l'équation de Schrödinger est modifiée par l'adjonction d'un petit terme stochastique. Ce terme est choisi de façon à rester totalement négligeable au niveau microscopique, tout en intervenant à partir d'un certain niveau macroscopique ; dans ce cas, il supprime toutes les composantes macroscopiquement distinctes du vecteur d'état, sauf une. Les deux dynamiques, de Schrödinger et de von Neumann, sont ainsi unifiées dans une seule équation de propagation du vecteur d'état. Mais il existe bien d'autres interprétations : variables supplémentaires, interprétation modale, Everett, qui proposent de résoudre le problème de façons différentes ; nous renvoyons le lecteur intéressé par ces questions à la référence [65].

E. Expériences "quel chemin" : peut-on identifier le chemin suivi par le photon dans l'expérience des fentes d'Young ?

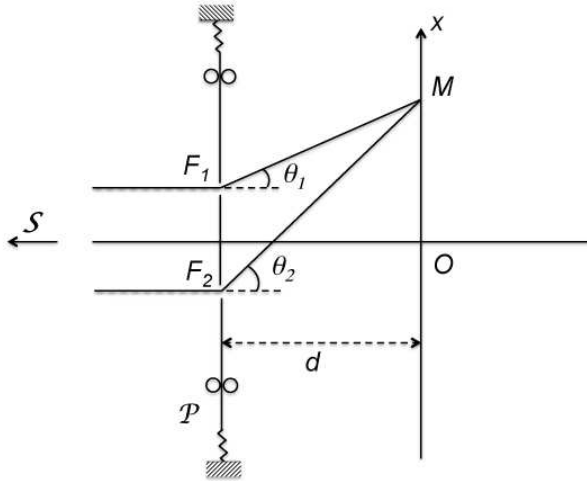


FIGURE 1 – Expérience des franges d'Young utilisant une plaque \mathcal{P} mobile le long de l'axe x et percée de deux fentes F_1 et F_2 . Un photon émis par une source S rejetée à l'infini arrive sur l'écran de détection au point M . L'impulsion qu'il communique à la plaque le long de l'axe x prend une valeur différente selon qu'il passe par la fente F_1 ou F_2 .

Revenons maintenant sur une question qui a déjà été discutée dans le Complément D_1 : dans l'expérience des franges d'Young où le photon peut suivre deux chemins distincts pour arriver sur l'écran de détection, est-il possible d'observer des franges d'interférence entre ces chemins tout en obtenant une information sur le chemin par lequel le photon est passé ? La Figure 1 de ce Complément D_1 , que nous reprenons ici dans la Figure 1, représente un dispositif expérimental d'interférences utilisant une plaque percée des deux fentes F_1 et F_2 , cette plaque étant mobile dans la direction perpendiculaire au photon incident. Elle reçoit alors des transferts d'impulsion Δp_1 et Δp_2 différents selon que le photon passe par F_1 ou F_2 , de sorte que l'on pourrait naïvement espérer observer des interférences tout en sachant par quelle fente la particule est passée. Cependant, en utilisant les relations d'incertitude position-impulsion appliquées à la plaque, nous avons alors montré que les franges d'interférence sont brouillées dès que les transferts d'impulsion Δp_1 et Δp_2 sont suffisamment différents pour que l'on puisse obtenir cette information. La raison est que, si l'on veut discerner ces deux transferts d'impulsion, l'incertitude en impulsion de la plaque doit être inférieure au module de $\Delta p_1 - \Delta p_2$. Un calcul simple montre alors que l'incertitude en position de la plaque est supérieure à l'interfrange, ce qui entraîne le brouillage des franges. Il est donc impossible de savoir par quelle fente le photon est passé sans détruire par là même la figure d'interférence.

Nous allons ici pousser l'analyse un peu plus loin en considérant l'intrication entre la plaque et les chemins suivis par le photon. Ceci nous permettra d'envisager des situations intermédiaires où des informations partielles sur le trajet de la

particule peuvent être recueillies.

E-1. Intrication entre les états du photon et ceux de la plaque

Considérons le chemin F_1M suivi par le photon s’il passe par F_1 et arrive en M sur l’écran de détection (Figure 1). Appelons $|\psi_1\rangle$ l’état du photon quand il suit ce chemin et transfère une impulsion Δp_1 à la plaque lors du passage par F_1 . Dans ce cas, après passage du photon, l’état de la plaque est :

$$|E_1\rangle = \exp(i\Delta p_1 X)|E_0\rangle \tag{E-1}$$

où $|E_0\rangle$ est l’état initial de la plaque et $\exp(i\Delta p_1 X)$ l’opérateur de translation d’une quantité Δp_1 dans l’espace des impulsions. L’état du système global photon + plaque le long du chemin F_1M est donc $|\psi_1\rangle \otimes |E_1\rangle$. Un raisonnement analogue donnerait le résultat $|\psi_2\rangle \otimes |E_2\rangle$ le long du chemin F_2M . La linéarité de l’équation de Schrödinger entraîne alors que l’état du système global après traversée de la plaque est :

$$|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |E_1\rangle + |\psi_2\rangle \otimes |E_2\rangle \tag{E-2}$$

qui montre clairement qu’il existe une intrication entre le photon⁵ et la plaque.

E-2. Prédications sur les mesures effectuées sur le photon

Les prédictions de ces mesures effectuées sur le seul photon après traversée de la plaque se calculent à partir de l’opérateur densité réduit ρ , trace partielle sur les variables de la plaque de l’opérateur densité $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ du système global. Les éléments de matrice de ρ sont obtenus par calcul standard d’une trace partielle (Complément E_{III} § 5.b) et conduisent à l’expression operatorielle :

$$\rho = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + |\psi_1\rangle\langle\psi_2|\langle E_2|E_1\rangle + |\psi_2\rangle\langle\psi_1|\langle E_1|E_2\rangle \tag{E-3}$$

(nous n’avons pas fait apparaître dans cette équation les produits scalaires $\langle E_1|E_1\rangle$ et $\langle E_2|E_2\rangle$ qui multiplient $|\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ et $|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$, car ils sont égaux à 1 si l’état $|E_0\rangle$ est normé). Les interférences entre les deux chemins sont décrites par les termes en $|\psi_1\rangle\langle\psi_2|$ et $|\psi_2\rangle\langle\psi_1|$. Ces termes sont multipliés par les produits scalaires $\langle E_2|E_1\rangle$ et $\langle E_1|E_2\rangle$.

Deux situations limites apparaissent alors. Si les deux états $|E_1\rangle$ et $|E_2\rangle$ diffèrent très peu, les deux produits scalaires sont pratiquement égaux à 1 et les termes d’interférence ne sont presque pas modifiés dans (E-3) par la présence des facteurs $\langle E_2|E_1\rangle$ et $\langle E_1|E_2\rangle$; les interférences sont alors bien visibles. Mais les états $|E_1\rangle$ et $|E_2\rangle$ sont alors trop peu différents pour que l’on puisse obtenir une information sur le fait que le photon est passé par F_1 ou F_2 . Dans l’autre situation limite où $|E_1\rangle$ et $|E_2\rangle$ sont très différents, leur produit scalaire est presque nul, et l’on peut en principe déterminer par quelle fente le photon est passé; mais les termes d’interférence disparaissent alors dans (E-3). Le calcul présenté ici permet donc d’étudier les situations intermédiaires où les produits scalaires $\langle E_2|E_1\rangle$ et $\langle E_1|E_2\rangle$ prennent des valeurs comprises entre 0 et 1. Ils décrivent comment le contraste des franges diminue quand $\langle E_2|E_1\rangle$ et $\langle E_1|E_2\rangle$ décroissent de manière continue de 1 à 0.

5. Toutes les conclusions de cette section demeurent valables pour des expériences de type franges d’Young réalisées avec une particule matérielle au lieu d’un photon.

Ces produits scalaires se calculent d'ailleurs aisément à partir de (E-1) et de l'équation équivalente pour E_2 . On obtient en effet à partir de ces équations :

$$\langle E_2|E_1 \rangle = \langle E_0|\exp [i(\Delta p_1 - \Delta p_2)x]|E_0 \rangle \quad (\text{E-4})$$

En utilisant l'expression de $\Delta p_1 - \Delta p_2$ (qui est notée $p_1 - p_2$ dans le Complément D₁) et les équations (6) et (7) de ce complément, on montre que $\langle E_2|E_1 \rangle$ et $\langle E_1|E_2 \rangle$ sont égaux aux intégrales de recouvrement de la fonction d'onde initiale de la plaque et de la même fonction d'onde translatée dans l'espace des impulsions d'une quantité égale à h/a où a est l'interfrange.

F. Intrication, non-localité, théorème de Bell

Nous allons maintenant présenter deux théorèmes importants, le théorème EPR (pour Einstein, Podolsky et Rosen) et celui de Bell, qui sont dans la même ligne ; le second est en fait le prolongement logique du premier. Le théorème EPR est contenu dans un article publié en 1935 par ces trois auteurs, et constitue un épisode de la fameuse discussion entre Einstein et Bohr concernant les fondements de la mécanique quantique (en particulier aux congrès Solvay). Einstein défendait un point de vue où toute la physique doit pouvoir s'exprimer dans le cadre général que fournit la relativité, où la notion d'événement d'espace-temps est fondamentale. Bohr avait un point de vue différent, et considérait que la théorie quantique nécessitait une renonciation à une description des événements microscopiques en termes d'espace-temps, sans bien sûr pour autant violer les prédictions concrètes de la relativité.

F-1. L'argument EPR

Le théorème EPR peut être énoncé de la façon suivante : *“Si toutes les prédictions de la mécanique quantique sont correctes (même pour des systèmes constitués de plusieurs particules éloignées) et si la réalité physique peut être décrite dans un cadre local (ou séparable), alors la mécanique quantique est nécessairement incomplète : il existe dans la Nature des ‘éléments de réalité’ qui sont laissés de côté par cette théorie”.*

Pour le démontrer, Einstein, Podolsky et Rosen considèrent une expérience où deux systèmes physiques, qui proviennent par exemple d'une source commune S et sont décrits par un état quantique intriqué, subissent des mesures en des régions éloignées de l'espace. Historiquement, EPR ont introduit leur argument en termes de particules corrélées dont on mesure la position et l'impulsion. Il est cependant plus pratique d'utiliser une version équivalente de l'argument qui met en jeu des spins et des résultats discrets, version initialement introduite par Bohm (et souvent appelée pour cette raison EPRB).

F-1-a. Exposé de l'argument

Supposons que deux particules de spin 1/2 soient émises par une source S dans un état singulet (B-1), donc un état intriqué où leurs spins sont fortement corrélés. Les particules se propagent ensuite vers deux régions éloignées de l'espace sans que leurs spins interagissent avec l'extérieur ; l'intrication initiale entre les spins subsiste donc sans changement. Dans ces régions éloignées, elles sont soumises à des mesures des composantes de leurs spins selon la direction repérée par l'angle a pour

la région de gauche, et par l'angle b pour la région de droite (Fig. 2). On appelle souvent Alice et Bob les deux opérateurs qui effectuent ces expériences dans des laboratoires différents, qui peuvent être très éloignés l'un de l'autre. Alice choisit librement la direction a , qui définit son "type de mesure". Avec un spin $1/2$, elle ne peut obtenir que deux résultats, que par convention on note $+1$ ou -1 ; c'est le cas, quel que soit le type de mesure choisi. De même, Bob choisit arbitrairement la direction b et obtient l'un des résultats $+1$ ou -1 . Dans l'expérience de pensée EPRB, on suppose pour simplifier que les deux spins, une fois émis par la source, n'interagissent qu'avec les appareils de mesure (sans avoir d'évolution propre, comme mentionné plus haut); la mécanique quantique standard prédit alors (§ B) que les distances et les instants auxquels les mesures sont effectuées ne jouent aucun rôle dans les probabilités d'obtenir les différents couples possibles de résultats.

Pour simplifier, supposons qu'Alice et Bob limitent leurs choix à un nombre fini d'orientations a et b pour leurs mesures respectives. Il se produira alors des cas où, par hasard, les directions choisies sont parallèles. Or, lorsque les angles a et b sont choisis égaux (directions de mesures parallèles), les relations (B-10) indiquent que les résultats sont toujours opposés pour les deux mesures : chaque fois qu'Alice observe ± 1 , Bob observe la valeur opposée ∓ 1 . Ceci reste vrai même si les mesures ont lieu en des points très éloignés, quel que soit le choix $a = b$, et si les deux opérateurs opèrent de façon totalement indépendante dans leurs régions de l'espace ; ils font par exemple un choix au dernier moment, après l'émission et la propagation de la paire de particules.

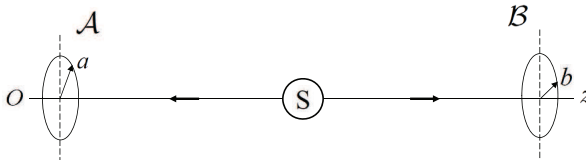


FIGURE 2 – Dans une expérience EPRB, une source S émet des paires de particules dans un état de spin singulet (état quantique intriqué). Ces particules se propagent ensuite le long de l'axe Oz vers deux régions éloignées de l'espace A et B , où des appareils de Stern-Gerlach sont utilisés par les opérateurs Alice et Bob pour mesurer les composantes de leurs spins sur des directions perpendiculaires à Oz . Pour la première particule, la direction de mesure est définie par l'angle a , pour la seconde par l'angle b . Chaque mesure fournit le résultat $+1$ ou -1 , et l'on s'intéresse aux corrélations entre ces résultats lorsque l'expérience est répétée un grand nombre de fois.

Supposons alors qu'Alice effectue sa mesure le long d'une direction a avant que Bob n'effectue la sienne. Au moment où elle a terminé sa mesure il devient certain que, si Bob décide de choisir la direction b parallèle à a , il va observer le résultat opposé ; le résultat est donc certain dans ce cas. Une telle certitude ne peut découler que du fait que la particule mesurée par Bob possède une propriété physique qui dé-

termine le résultat connu à l'avance ; cette propriété (appelée "élément de réalité" par EPR) va influencer la manière dont la particule interagit avec l'appareil de mesure en B et déterminer le résultat. Mais, d'autre part, la particule qui se propage vers Bob ne peut subir aucune influence des événements se produisant dans le laboratoire d'Alice. La propriété physique en question existait donc avant la mesure effectuée par Alice.

Bien évidemment, le raisonnement est symétrique et montre que, avant toute mesure, les deux particules possédaient déjà des propriétés physiques qui déterminent les résultats de mesures à venir. Comme la direction a choisie par Alice est quelconque, les particules possèdent suffisamment de propriétés pour déterminer les résultats quelles que soient les directions d'analyse choisies par les opérateurs. Or la mécanique quantique ne prévoit pas l'existence de telles propriétés, puisqu'elle ne donne une description des particules que par un vecteur d'état singulet qui prédit toujours un résultat de mesure totalement aléatoire pour la première mesure. De plus, il n'existe aucun état quantique où toutes les composantes d'un spin sur des directions quelconques sont simultanément déterminées (les opérateurs correspondants ne commutent pas). C'est donc que la mécanique quantique ne rend compte que partiellement des propriétés physiques du système ; elle est par conséquent incomplète.

F-1-b. Hypothèses et conclusions

Analysons plus en détail la structure logique du raisonnement EPR.

(i) Le point de départ est de supposer que les prédictions de la mécanique quantique concernant les probabilités de résultats de mesure sont correctes. Le raisonnement suppose que les corrélations parfaites prédites par cette théorie sont toujours observées, quelle que soit la distance entre les appareils de mesure.

(ii) Un autre ingrédient essentiel du raisonnement EPR est la notion appelée "éléments de réalité". EPR proposent pour la définir le critère suivant : "si, sans perturber en aucune façon le système, nous pouvons prédire avec certitude la valeur d'une quantité physique, alors il existe un élément de réalité physique correspondant à cette quantité physique". En d'autres termes, une certitude ne peut émerger à partir de rien : un résultat expérimental qui est connu à l'avance ne peut être que la conséquence d'une quantité physique préexistante.

(iii) Un dernier ingrédient du raisonnement EPR, tout à fait essentiel, est la notion d'espace-temps et de localité : les éléments de réalité en question sont attachés aux régions de l'espace où ont lieu les expériences, et ne peuvent pas varier soudainement sous l'influence d'événements se produisant dans une autre région très éloignée. Ils peuvent encore moins apparaître dans de telles conditions. Einstein a écrit en 1948 : "*Les objets de la physique baignent dans un continuum d'espace-temps. Ces objets demandent une existence autonome dans la mesure où ils se trouvent dans des parties différentes de l'espace*". On peut résumer la situation en disant que la conviction de base de EPR est que les régions de l'espace contiennent des éléments de réalité qui leurs sont propres (faire correspondre des éléments de réalité distincts à des régions de l'espace séparées est parfois appelé "séparabilité"), et qu'ils évoluent dans le temps de façon locale – on parle souvent de "réalisme local" dans la littérature pour qualifier l'ensemble des hypothèses de EPR.

A partir de ces hypothèses EPR montrent que, quelles que soient les valeurs choisies pour a et b , les résultats des mesures sont des fonctions :

(i) des propriétés individuelles des spins qu'ils emportent avec eux (les éléments de réalité EPR) ;

(ii) ainsi, bien sûr, que des orientations a , b des analyseurs de Stern et Gerlach. Il s'ensuit que les résultats sont donnés par des fonctions bien définies de ces variables, ce qui implique qu'aucun processus non déterministe ne se produit : une particule à spin transporte avec elle toute l'information nécessaire pour fournir le résultat d'une mesure future, quel que soit le choix de l'orientation a (pour la première particule) ou b (pour la seconde). Il en découle que toutes les composantes de chaque spin ont simultanément des valeurs bien déterminées.

F-2. La réponse de Bohr, non-séparabilité

Bohr a rapidement répondu à l'article où EPR exposaient leur argument. Pour Bohr, le seul système physique qui doit être pris en compte est l'ensemble du dispositif expérimental, comprenant le système quantique mesuré et tous les appareils de mesure, qui sont classiques. De son point de vue, tout raisonnement qui cherche à distinguer au sein de cet ensemble des sous-systèmes munis de propriétés physiques individuelles n'a pas de sens. Le système physique qu'il considère est un tout, qu'il ne faut pas tenter de séparer en parties. Cette règle est souvent appelée "non-séparabilité". Bohr considère donc que la séparation spatiale n'entraîne pas la séparabilité.

Bohr ne critique donc en rien le raisonnement EPR, mais considère que leurs hypothèses de départ ne sont pas appropriées au cadre de la physique quantique. Pour lui, le critère de réalité physique proposé par EPR "contient une ambiguïté essentielle lorsqu'on l'applique aux phénomènes quantiques". Dans la même ligne, plus de dix ans plus tard (en 1948), Bohr caractérisait son point de vue en écrivant : "En résumé, l'impossibilité de subdiviser les effets quantiques individuels, de séparer le comportement des objets de leur interaction avec les appareils de mesure qui sont utilisés pour définir les conditions dans lesquelles le phénomène apparaît implique une ambiguïté lorsqu'on cherche à attribuer des attributs conventionnels à des objets atomiques, ce qui nous pousse à reconsidérer notre attitude concernant le problème d'une explication physique". C'est la nécessité même d'une telle explication physique qui est remise en question par Bohr.

Bohr réfute donc l'idée de base d'Einstein, à savoir que l'on peut attribuer des propriétés physiques distinctes à deux objets contenus dans des régions très différentes d'espace-temps. Pour lui, la "non-séparabilité quantique" s'applique même dans une telle situation. On comprend la réticence d'Einstein à renoncer à des concepts qui sont des piliers des relativités restreinte et générale (gravitation).

F-3. Inégalités de Bell

Plus de trente ans après la parution de l'argument EPR, en 1964, un article de Bell est venu apporter un éclairage totalement nouveau sur la question. Cet article reprend en quelque sorte la balle au bond et continue l'argument EPR à partir du point où ses auteurs l'avaient laissé. Prenant au sérieux l'existence des éléments de réalité EPR, et s'appuyant à nouveau sur les mêmes considérations de réalisme local, il montre qu'il n'existe en réalité aucune façon de compléter la mécanique quantique sans changer ses prédictions, au moins dans certains cas. En conséquence il faut, soit admettre que certaines prédictions de la mécanique quantique sont parfois

incorrectes, soit abandonner certaines des hypothèses de EPR, si naturelles qu'elles puissent paraître.

F-3-a. Le théorème de Bell

Suivant Bell, supposons que λ représente les “éléments de réalité” associés aux spins ; en fait λ n'est qu'une notation concise qui peut parfaitement sous-entendre un vecteur avec de très nombreuses composantes, de sorte que le nombre d'éléments de réalité inclus dans λ est totalement arbitraire. Il est d'ailleurs parfaitement possible d'inclure dans λ des composantes qui ne jouent aucun rôle particulier dans le problème ; la seule chose importante est que λ contienne suffisamment d'information pour donner les résultats de toutes les mesures envisageables sur les spins. Pour chaque paire de spins émise lors d'une réalisation de l'expérience, λ est fixé.

Une autre notation usuelle pour les résultats des deux mesures est A et B , à ne pas confondre avec les lettres minuscules a et b utilisées pour les paramètres de la mesure des deux appareils. Bien évidemment, A et B peuvent dépendre, non seulement de λ , mais également des paramètres de mesure a et b ; néanmoins, la localité impose que b n'ait aucune influence sur le résultat A (du fait que la distance entre les mesures est arbitrairement grande) ; inversement, a n'a aucune influence sur le résultat B . Nous notons donc $A(a, \lambda)$ et $B(b, \lambda)$ les fonctions correspondantes, qui prennent les deux valeurs $+1$ ou -1 . La Figure 3 schématise l'expérience envisagée.

Pour établir le théorème de Bell, il est suffisant de prendre en compte deux directions seulement pour chaque mesure individuelle ; nous utiliserons donc la notation plus simple :

$$A \equiv A(a, \lambda) \quad A' \equiv A(a', \lambda) \tag{F-1}$$

et :

$$B \equiv B(b, \lambda) \quad B' \equiv B(b', \lambda) \tag{F-2}$$

Pour chaque paire de particules émise, puisque λ est fixé, les quatre nombres ont des valeurs bien définies, qui ne peuvent chacune être que ± 1 .

Considérons alors la somme de produits :

$$M(\lambda) = AB - AB' + A'B + A'B' \tag{F-3}$$

que nous pouvons également écrire :

$$M(\lambda) = A(B - B') + A'(B + B') \tag{F-4}$$

Si $B = B'$, l'expression ci-dessus se réduit à $2A'B = \pm 2$; si $B = -B'$, elle se réduit à $2AB = \pm 2$. Dans tous les cas, on voit donc que $M = \pm 2$.

Si maintenant nous prenons la valeur moyenne $\langle M \rangle$ de $M(\lambda)$ sur un grand nombre de paires émises (moyenne sur λ), nous avons :

$$\langle M \rangle = \langle AB \rangle_\lambda - \langle AB' \rangle_\lambda + \langle A'B \rangle_\lambda + \langle A'B' \rangle_\lambda \tag{F-5}$$

où $\langle AB \rangle_\lambda$ désigne la valeur moyenne sur λ du produit $AB \equiv A(a, \lambda)B(b, \lambda)$, et où des notations similaires sont utilisées pour les 3 autres termes. Comme chaque $M(\lambda)$ ne peut prendre que les deux valeurs ± 2 , nous avons donc nécessairement :

$$-2 \leq \langle M \rangle \leq +2 \tag{F-6}$$

Ce résultat est la forme dite BCHSH (Bell, Clauser, Horne, Shimony et Holt) du théorème de Bell. L'inégalité est satisfaite pour toutes les sortes de mesures qui fournissent des résultats aléatoires, quel que soit le mécanisme qui crée les corrélations, pourvu que la condition de localité soit respectée : A est indépendant du paramètre de mesure b , et B est indépendant de a .

Toute théorie entrant dans le cadre du "réalisme local" doit donc conduire à des prédictions qui satisfont la relation (F-6). Le réalisme est nécessaire puisque nous avons fait usage dans la démonstration de la notion d'éléments de réalité EPR pour en déduire l'existence des fonctions A et B ; la localité l'est également puisque c'est elle qui interdit à A de dépendre de b et, inversement, à B de dépendre de a .

La simplicité de cette démonstration est telle qu'on peut s'attendre à ce que l'inégalité reste valable dans de nombreuses situations. C'est effectivement très souvent le cas, chaque fois que les corrélations observées peuvent être expliquées par des fluctuations d'une cause commune dans le passé ; on les qualifie alors de "corrélations classiques". Dans un tel cas, pour chaque réalisation de l'expérience cette cause commune est fixée, de sorte que les 4 nombres A , B , A' et B' prennent des valeurs bien définies (même si elles sont a priori inconnues), toutes égales à ± 1 ; le nombre M est donc lui aussi bien défini, égal à -2 ou $+2$. Quelles que soient les valeurs qui peuvent apparaître dans une série quelconque de N mesures, il est mathématiquement impossible à la somme des M de dépasser $2N$ ou d'être plus petite que $-2N$. En conséquence, la valeur moyenne obtenue en divisant par N satisfait nécessairement (F-6) : la simple existence des 4 nombres est suffisante pour obtenir l'inégalité.

F-3-b. Contradictions

Il semble naturel que toute théorie physique raisonnable conduise automatiquement à des prédictions qui satisfassent cette inégalité. Or, de façon surprenante, ce n'est pas le cas de la mécanique quantique, et de plus cette contradiction a été confirmée par les expériences.

α. Contradictions avec les prédictions de la mécanique quantique

Les relations (B-10) nous permettent de calculer la valeur moyenne $\Pi(a, b)$ du produit des résultats ± 1 fournis par des mesures des deux spins selon des directions faisant entre elles un angle θ_{ab} :

$$\Pi(a, b) = \mathcal{P}_{+,+} + \mathcal{P}_{-,-} - \mathcal{P}_{+,-} - \mathcal{P}_{-,+} = -\cos \theta_{ab} \tag{F-7}$$

Cette expression est l'équivalent quantique de la valeur moyenne sur la variable λ du produit $A(a, \lambda)B(b, \lambda)$ dans une théorie réaliste locale. Pour obtenir l'équivalent quantique $\langle Q \rangle$ de la combinaison des quatre produits de résultats figurant dans l'expression (F-3), on calcule la même combinaison des valeurs moyennes de produits de résultats, ce qui donne :

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle &= \langle \Pi(a, b) \rangle - \langle \Pi(a, b') \rangle + \langle \Pi(a', b) \rangle + \langle \Pi(a', b') \rangle \\ &= -\cos \theta_{ab} + \cos \theta_{ab'} - \cos \theta_{a'b} - \cos \theta_{a'b'} \end{aligned} \tag{F-8}$$

Supposons alors que les quatre directions soient dans un même plan, et que les vecteurs rangés dans l'ordre \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{a}' et \mathbf{b}' fassent chacun un angle de 45° avec le

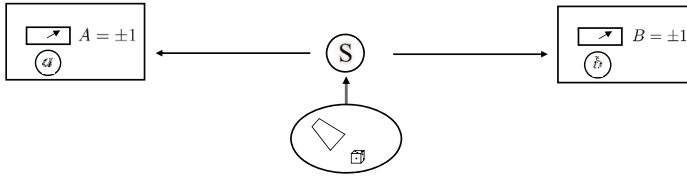


FIGURE 3 – Une source S émet des particules vers deux appareils de mesure situés en des points éloignés, réglés avec des paramètres de mesure respectifs a et b ; chaque appareil fournit un résultat ± 1 . L’ovale sous la source symbolise un processus aléatoire fluctuant qui contrôle les conditions d’émission des particules, et donc leurs propriétés. On observe des corrélations entre les résultats obtenus ; ces corrélations sont la conséquence des propriétés aléatoires communes que les particules ont acquises lors de leur émission sous l’effet du processus fluctuant.

précédent (Fig. 4) ; tous les cosinus valent alors $1/\sqrt{2}$, sauf $\cos \theta_{ab'}$ qui vaut $-1/\sqrt{2}$. Il vient alors $\langle Q \rangle = -2\sqrt{2}$; si l’on renverse les directions de \mathbf{b} et \mathbf{b}' , on obtient $\langle Q \rangle = 2\sqrt{2}$. Dans les deux cas, on obtient ainsi une violation de l’inégalité BCHSH (F-6) par un facteur $\sqrt{2}$, donc plus de 40 %. Malgré l’apparente simplicité de la variation en cosinus contenue dans l’expression (B-10), nous constatons par ce raisonnement qu’aucune théorie locale réaliste n’est capable de la reproduire, puisqu’elle violerait l’inégalité (F-6). Ainsi le raisonnement de EPR-Bell conduit à une contradiction quantitative importante avec la mécanique quantique, montrant que cette dernière n’est pas une théorie réaliste locale dans le sens de EPR.

Comment cette contradiction est-elle possible, et comment un raisonnement apparemment aussi inattaquable peut-il ne pas s’appliquer à la mécanique quantique ? Plusieurs réponses sont possibles :

(i) S’il avait connu le théorème de Bell, Bohr aurait très probablement rejeté l’existence de 4 nombres pré-existants A, A', B, B' . Si ces nombres n’existent pas, le raisonnement du § F-3-a n’est plus possible et l’inégalité BCHSH disparaît. Ainsi, Bohr aurait probablement considéré le théorème comme mathématiquement correct en théorie des probabilités, mais totalement inapproprié en mécanique quantique, car sans rapport avec la description quantique de l’expérience considérée.

Peut-être cependant aurait-il accepté de raisonner sur ces nombres comme des inconnues qui seront déterminées plus tard, comme on le fait souvent en algèbre ; mais n’est-il alors pas possible d’obtenir l’inégalité ? A nouveau, la réponse à cette question est en fait non, toujours en se plaçant dans la logique de Bohr. En effet, et

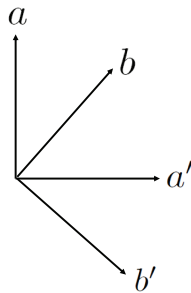


FIGURE 4 – Position des quatre vecteurs a , b , a' et b' donnant lieu à une violation maximale de l'inégalité BCHSH avec deux spins $1/2$ dans un état singulet. Ces vecteurs définissent les composantes des spins à mesurer, selon a ou a' pour le spin de gauche, selon b ou b' pour celui de droite. Ceci conduit à considérer quatre dispositifs distincts pour l'ensemble de l'expérience. Le seul couple de vecteurs conduisant à une corrélation négative entre les résultats des deux mesures est (a, b') , du fait que l'angle entre les directions dépasse 90° .

comme nous l'avons déjà indiqué au § F-2, son point de vue est que seul l'ensemble de l'expérience doit être pris en compte, comme un tout. Il ne faut pas y distinguer deux mesures séparées qui seraient effectuées chacune sur l'une des particules : l'unique véritable processus de mesure concerne l'ensemble des deux particules à la fois. Un processus fondamentalement indéterministe et délocalisé se produit dans toute la région de l'espace occupée par l'expérience.

Les fonctions A et B dépendent alors toutes deux des deux paramètres de mesure, de sorte qu'elles doivent être écrites $A(a, b)$ et $B(a, b)$, ce qui implique immédiatement une renonciation à la localité. Au lieu de 2 nombres A et A' , nous en avons maintenant 4, qui sont $A = A(a, b)$, $A' = A(a', b)$, ainsi que $A'' = A(a, b')$ et $A''' = A(a', b')$; il en est de même pour B et B' , qui sont remplacés par 4 nombres. Ainsi, il faut maintenant prendre en compte 8 nombres en tout, au lieu de 4. La démonstration de l'inégalité BCHSH n'est alors plus possible, et la contradiction disparaît.

(ii) On peut préférer un point de vue plus local sur le processus de mesure, et conserver le concept de mesure sur une seule particule comme valable dans ce contexte. Pour éviter la contradiction avec les prédictions de la mécanique quantique, on considère alors qu'il est dépourvu de sens d'attribuer quatre valeurs bien définies A , A' , B , B' à chaque paire. Du fait que, au maximum, seulement deux d'entre elles peuvent être mesurées dans chaque réalisation de l'expérience, nous ne pouvons parler de ces quatre nombres ou raisonner sur eux, même comme des quantités inconnues. Une phrase fameuse de Peres résume très clairement la situation : “des expériences qui n'ont pas été réalisées n'ont aucun résultat”, c'est tout ! Wheeler

va dans la même direction quand il écrit : “*aucun phénomène élémentaire n’est un phénomène tant qu’il n’est pas un phénomène enregistré (observé)*”.

β. Contradictions avec les expériences

La question se posait donc : le théorème de Bell permet-il de mettre le doigt sur des situations très particulières où la mécanique quantique cesse d’être valable ? Ou, au contraire, les prévisions de la mécanique quantique sont-elles correctes dans tous les cas, ce qui implique immédiatement que certaines des hypothèses qui ont permis d’établir les inégalités doivent être abandonnées ? Un grand nombre d’expériences ont été réalisées à partir de 1972 et, toutes, elles ont permis de confirmer les prédictions de la mécanique quantique et de mesurer des violations des inégalités de Bell, parfois avec une grande précision [68].

Après une période de doute, il semble donc bien établi que la mécanique quantique donne des prévisions parfaitement correctes, même dans des situations où elle implique des violations des inégalités de Bell. Si plausibles qu’elles puissent paraître, il faut donc renoncer à l’une (au moins) des hypothèses qui ont conduit à ces inégalités.

Conclusion

La notion d’intrication quantique est donc particulièrement importante ; elle correspond à des situations où des types de corrélations peuvent être produites et observées, alors qu’elles seraient totalement impossibles en physique classique. Ceci peut se produire même si les observations sont effectuées en des régions de l’espace arbitrairement éloignées l’une de l’autre. Une idée fondamentale de la mécanique quantique est que la description la plus précise possible d’un tout n’inclut pas nécessairement une description aussi précise de ses parties, ce qui est sans équivalent classique. Il en découle que la description d’un système de deux particules éloignées et intriquées dans le cadre d’une théorie réaliste et locale est impossible (contradictoire avec la mécanique quantique).

L’intrication joue également un rôle essentiel dans les processus de mesure, et intervient à différents niveaux : intrication entre le système mesuré S et l’appareil de mesure M , entre M et l’environnement E , entre deux environnements E et E' , etc. Nous avons également vu comment c’est elle qui détermine le contraste des franges observées dans une expérience d’interférence où une particule passe à travers une plaque percée de deux trous.

Outre ces aspects importants, l’intrication intervient de façon essentielle dans tout le domaine de l’information quantique, où l’on cherche à tirer parti de l’évolution parallèle des diverses branches intriquées du vecteur d’état pour réaliser des calculs. Il s’agit là d’un sujet de recherche qui s’est beaucoup développé au cours des années récentes, mais qui est trop large pour être traité dans le présent ouvrage ; nous renvoyons le lecteur à des ouvrages spécialisés sur le sujet, par exemple celui de D. Mermin [66]. L’intrication joue également un rôle central dans tout le domaine de la cryptographie quantique, qui vise à réaliser des dispositifs de transmission de clés cryptographiques qu’il est fondamentalement impossible d’espionner sans que les effets de cet espionnage soient détectables ; une revue de ce sujet peut être trouvée dans l’article de N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel et H. Zbinden [67].

Il subsiste que, en présence d'intrication, et en particulier lors du processus de mesure, l'interprétation standard de la mécanique quantique peut présenter des difficultés. Son équation dynamique de Schrödinger ne prévoit pas l'unicité du résultat de mesure. De façon générale, elle ne prévoit pas l'unicité du monde macroscopique. Pour l'obtenir au sein de la théorie, on peut introduire un postulat ad hoc, par exemple le postulat de réduction du vecteur d'état de von Neumann. Mais cela pose alors des problèmes de frontière : quand exactement faut-il cesser d'appliquer l'évolution continue de Schrödinger pour utiliser la réduction du vecteur d'état ? Comment réconcilier l'irréversibilité intrinsèque du second postulat avec la réversibilité de l'équation de Schrödinger ?

Cela pose également le problème du statut du vecteur d'état. Nous l'avons utilisé dans tout ce livre comme un outil mathématique permettant de calculer des probabilités, mais que représente-t-il exactement ? Décrit-il directement la réalité physique ? Ou une information sur la réalité physique ? La référence [65] décrit un certain nombre d'interprétations de la mécanique quantique qui ont été proposées pour résoudre cette difficulté fondamentale.

COMPLÉMENTS DU CHAPITRE XXI

A_{XXI} : OPÉRATEUR DENSITÉ ET CORRÉLATIONS ; SÉPARABILITÉ

Ce complément introduit l'entropie statistique de von Neumann associée à un opérateur densité et discute ses propriétés, en particulier certaines inégalités importantes auxquelles elle obéit. Il discute également les différences entre corrélations classiques et quantiques (découlant des effets d'intrication quantique). La notion de "non-séparabilité quantique" est introduite.

B_{XXI} : ÉTATS GHZ ; ÉCHANGE D'INTRICATION

Les états GHZ fournissent un exemple de conflit entre la mécanique quantique et la notion usuelle de réalisme local. La contradiction entre les deux est encore plus nette que pour les inégalités de Bell, puisqu'elle s'exprime par une opposition de signes. L'échange d'intrication permet d'intriquer des particules sans qu'aucune interaction entre elles n'ait à se produire.

C_{XXI} : ÉMÉRGENCE D'UNE PHASE RELATIVE SOUS L'EFFET DU PROCESSUS DE DÉTECTION

Lorsque deux condensats de Bose-Einstein se recouvrent, leur phase relative est a priori totalement indéterminée. Cependant, une telle phase peut apparaître sous l'effet de processus de mesure, qui sont sensibles à cette phase ; ils la fixent progressivement de mieux en mieux au fur et à mesure de l'accumulation des résultats.

D_{XXI} : ÉMÉRGENCE D'UNE PHASE RELATIVE AVEC DES CONDENSATS À SPIN ; ARGUMENT EPR ET NON-LOCALITÉ MACROSCOPIQUES

Ce complément prolonge le précédent en étudiant le cas où les condensats sont constitués de particules munies de spin. Le même phénomène de détermination de la phase se produit, mais dans un cas où l'argument EPR prend une force particulière du fait du caractère macroscopique des grandeurs mesurées. De plus, il peut conduire à des violations des inégalités de Bell. Ceci prouve que la phase relative qui apparaît entre les deux condensats sous l'effet de la mesure n'est pas de nature classique.

Complément A_{XXI}

Opérateur densité et corrélations ; séparabilité

1	Entropie statistique de von Neumann	653
	1-a Définition générale	653
	1-b Système physique composé de deux sous-systèmes	655
2	Différences entre corrélations classiques et quantiques	656
	2-a Deux niveaux de corrélations	656
	2-b Monogamie quantique	657
3	Séparabilité	659
	3-a Opérateur densité séparable	659
	3-b Deux spins dans un état singulet	661

Dans le Chapitre XXI, nous nous sommes surtout intéressés à des systèmes totaux $A + B$ qui sont décrits pas un vecteur d'état (état pur). Ce complément est consacré à un certain nombre de considérations portant sur le cas où ils sont décrits par un opérateur densité (mélange statistique) ; nous étudierons les corrélations qui peuvent exister en mécanique quantique entre les deux sous-systèmes A et B dans ce cas. Dans une première partie (§ 1), nous introduirons la notion d'entropie statistique, qui fournit une mesure commode de leur taux de corrélation. Puis, au § 2, nous analyserons les différences qui peuvent exister entre corrélations classiques (introduites au niveau des probabilités) et corrélations quantiques (qui peuvent, de plus, être introduites au niveau de superpositions cohérentes de vecteurs d'état). Enfin, au § 3, nous reviendrons sur l'important concept de séparabilité, déjà introduit au § F-2 du Chapitre XXI.

1. Entropie statistique de von Neumann

L'entropie statistique de von Neumann permet de distinguer immédiatement un état pur d'un mélange statistique et, dans le second cas, de quantifier le caractère statistique de l'information que l'on possède sur le système physique. C'est également un outil utile pour étudier de manière quantitative dans quelle mesure deux systèmes physiques sont corrélés.

1-a. Définition générale

A tout opérateur densité ρ on associe une entropie statistique S par la relation :

$$S = -k_B \text{Tr} \{ \rho \text{Log} \rho \} \tag{1}$$

où k_B est la constante de Boltzmann. Comme ρ est hermitique, cet opérateur est diagonalisable. Si ses valeurs propres sont notées n_k , nous avons :

$$S = -k_B \sum_k n_k \text{Log} n_k \tag{2}$$

Comme tous les n_k sont compris entre 0 et 1, nous avons :

$$S \geq 0 \tag{3}$$

où l'égalité ne peut être obtenue que si ρ a une valeur propre égale à 1 et toutes les autres nulles. L'entropie associée à ρ n'est donc nulle que si cet opérateur est un projecteur, et correspond alors à un état pur. En revanche, chaque fois que ρ décrit un mélange statistique, S est non nulle. Elle est maximale lorsque l'opérateur densité ρ possède des populations égales dans tous les états accessibles au système, c'est-à-dire s'il est proportionnel à l'opérateur identité dans l'espace des états. En effet, si nous donnons des variations dn_k aux n_k et annulons la variation de la somme sur k de (2), tout en maintenant la somme des n_k constante grâce à un multiplicateur de Lagrange λ , nous obtenons :

$$\sum_k [1 + \text{Log } n_k + \lambda] dn_k = 0 \tag{4}$$

La nullité pour tout dn_k implique immédiatement que tous les $\text{Log } n_k$, donc tous les n_k eux-mêmes sont égaux.

On peut associer une notion d'information à l'entropie S , ou plus précisément d'information manquante. Lorsque le système physique est dans un état pur, cet état fournit l'information maximale possible sur le système compatible avec la mécanique quantique. Il n'y a alors aucune information manquante, et $S = 0$. En revanche, lorsque le système est réparti avec des probabilités comparables entre différents états purs, une grande valeur de S indique qu'il manque beaucoup d'informations sur le système.

Si l'on considère un mélange statistique de plusieurs opérateurs densité, l'entropie ne peut que croître sous l'effet de ce mélange. Supposons en effet que l'on combine un certain nombre d'opérateurs densité ρ_n avec des probabilités p_n (positives, et de somme sur n égale à 1) pour obtenir un opérateur densité ρ défini par :

$$\rho = \sum_n p_n \rho_n \tag{5}$$

Si les entropies associées aux ρ_n sont notées S_n :

$$S_n = -k_B \text{Tr} \{ \rho_n \text{Log} \rho_n \} \tag{6}$$

on a ¹ :

$$S \geq \sum_n p_n S_n \tag{7}$$

Démonstration :

Au § 1-b du Complément G_{XV}, nous avons montré que, si ρ et ρ' sont deux opérateurs densité de trace unité, l'inégalité suivante est toujours vérifiée :

$$\text{Tr} \{ \rho \text{Log} \rho \} \geq \text{Tr} \{ \rho \text{Log} \rho' \} \tag{8}$$

1. Cette propriété est souvent appelée "concavité de l'entropie".

(l'égalité étant réalisée seulement si $\rho' = \rho$). Nous avons donc :

$$\begin{aligned}
 -\frac{S}{k_B} &= \text{Tr} \{ \rho \text{Log} \rho \} = \sum_n p_n \text{Tr} \{ \rho_n \text{Log} \rho \} \\
 &\leq \sum_n p_n \text{Tr} \{ \rho_n \text{Log} \rho_n \} = -\frac{1}{k_B} \sum_n p_n S_n
 \end{aligned} \tag{9}$$

et la relation (7) est établie.

1-b. Système physique composé de deux sous-systèmes

Comparons maintenant les entropies S_{A+B} , S_A et S_B associées respectivement à l'opérateur densité total ρ_{A+B} et aux opérateurs densité partiels ρ_A et ρ_B . Nous allons voir que $S_A + S_B = S_{A+B}$ lorsque les systèmes A et B ne sont pas intriqués, et que sinon $S_A + S_B \geq S_{A+B}$.

α. Etat pur

Commençons par supposer que le système total est dans un état pur intriqué. Nous avons vu que ce n'est pas le cas pour les deux sous-systèmes A et B , qui ne sont pas décrits par des états purs, mais des mélanges statistiques, de sorte que :

$$\begin{aligned}
 S_A &= -k_B \text{Tr} \{ \rho_A \text{Log} \rho_A \} \geq 0 \\
 S_B &= -k_B \text{Tr} \{ \rho_B \text{Log} \rho_B \} \geq 0
 \end{aligned} \tag{10}$$

Comme l'entropie S_{A+B} associée à un état pur est nulle, il en découle que :

$$S_A + S_B \geq S_{A+B} \tag{11}$$

(l'égalité correspondant au cas particulier où l'état pur $|\Psi\rangle$ est un produit sans intrication, et où le rang de Schmidt est donc égal à 1 ; cf. Chapitre XXI, § C-3).

Nous pouvons également utiliser la décomposition de Schmidt de $|\Psi\rangle$ d'où découlent les relations (C-7) et (C-8) du Chapitre XXI pour obtenir :

$$S_A = -k_B \sum_i q_i \text{Log} q_i = S_B \tag{12}$$

Les deux entropies des deux sous-systèmes sont donc toujours égales quand le système total est dans un état pur.

β. Mélange statistique

Lorsque le système total est décrit par un opérateur densité ρ_{A+B} ne correspondant pas nécessairement à un état pur, son entropie S_{A+B} n'est pas nulle non plus. Nous allons cependant montrer que cette entropie reste toujours inférieure ou égale à la somme des entropies des deux sous-systèmes, de sorte que la relation (11) reste valable dans ce cas plus général ; cette propriété est appelée "sous-additivité de l'entropie". L'égalité dans (11) est obtenue uniquement quand ρ_{A+B} est un produit :

$$\rho_{A+B} = \rho_A \otimes \rho_B \tag{13}$$

ce qui correspond au cas de deux sous-systèmes qui sont séparément décrits par des mélanges statistiques, tout en restant non corrélés. La différence $S_A + S_B - S_{A+B}$

donne donc une estimation de la perte de précision entre la description quantique du système total et les deux descriptions quantiques séparées des deux sous-systèmes.

Démonstration :

Selon l'inégalité (8), nous avons :

$$\text{Tr} \{ \rho \text{Log} \rho \} \geq \text{Tr} \{ \rho \text{Log} (\rho_A \otimes \rho_B) \} \tag{14}$$

Nous notons $|u_i\rangle$ les vecteurs propres de ρ_A de valeurs propres q_i , et $|v_l\rangle$ les vecteurs propres de ρ_B de valeurs propres v_l . Calculons alors la trace du deuxième membre de (14) dans la base $\{|u_i, v_l\rangle\}$ des produits tensoriels des vecteurs propres des deux opérateurs, de valeurs propres respectives q_i et v_l ; nous obtenons :

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ \rho \text{Log} (\rho_A \otimes \rho_B) \} &= \sum_{i,l} \langle u_i, v_l | \rho \text{Log} (\rho_A \otimes \rho_B) | u_i, v_l \rangle \\ &= \sum_{i,l} \langle u_i, v_l | \rho \text{Log} (q_i \times v_l) | u_i, v_l \rangle \\ &= \sum_{i,l} \langle u_i, v_l | \rho | u_i, v_l \rangle \text{Log} (q_i) + \sum_{i,l} \langle u_i, v_l | \rho | u_i, v_l \rangle \text{Log} (v_l) \end{aligned} \tag{15}$$

Choisissons alors $\rho = \rho_{A+B}$. Le premier terme du second membre s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \sum_{i,l} \langle u_i, v_l | \rho_{A+B} | u_i, v_l \rangle \text{Log} (q_i) &= \sum_i \langle u_i | \rho_A | u_i \rangle \text{Log} (q_i) \\ &= \sum_i \langle u_i | \rho_A \text{Log} \rho_A | u_i \rangle \\ &= \text{Tr} \{ \rho_A \text{Log} \rho_A \} \end{aligned} \tag{16}$$

Le second terme du second membre de (15) donne une expression semblable, où B remplace A . Pour finir, l'inégalité (14) s'écrit sous la forme :

$$\text{Tr} \{ \rho_{A+B} \text{Log} \rho_{A+B} \} \geq \text{Tr} \{ \rho_A \text{Log} \rho_A \} + \text{Tr} \{ \rho_B \text{Log} \rho_B \} \tag{17}$$

d'où découle (11). L'égalité est réalisée si et seulement si (14) devient une égalité, donc si ρ_{A+B} est le produit (13).

2. Différences entre corrélations classiques et quantiques

La mécanique quantique contient des possibilités plus larges que la physique classique pour décrire des corrélations entre systèmes physiques. Nous en discutons ici brièvement quelques aspects.

2-a. Deux niveaux de corrélations

La notion de corrélation n'est pas en elle-même quantique, puisqu'elle est bien connue en physique classique. Cette notion classique se base sur le calcul des probabilités, c'est-à-dire sur des pondérations linéaires calculées sur un certain nombre de possibilités. On introduit pour cela une distribution donnant la probabilité que le premier système occupe un certain état et le second un autre état ; les deux systèmes sont corrélés lorsque cette distribution n'est pas un produit. Si, au contraire, c'est un produit, les deux systèmes ne sont pas corrélés ; une mesure effectuée sur l'un

d'entre eux ne change pas l'information que l'on possède sur l'autre. C'est le cas en particulier si les états de chacun des deux systèmes sont parfaitement définis (l'état du système total l'est alors également), de sorte que la notion de corrélation entre eux perd son intérêt. Ainsi la notion de corrélation entre deux sous-systèmes classiques est-elle intimement liée à celle d'une définition imparfaite de l'état du système total.

En mécanique quantique, il en va tout autrement. En premier lieu, même un système physique parfaitement défini par un vecteur d'état présente déjà des fluctuations de ses grandeurs physiques (en l'absence de toute fluctuation du vecteur d'état), et ces fluctuations peuvent donner lieu à des corrélations : par exemple, nous avons vu au § B du Chapitre XXI que les composantes de deux spins $1/2$ fluctuent de façon totalement corrélée dans un état singulet, qui est pourtant un état pur. De telles corrélations apparaissent parce que le principe de superposition de la mécanique quantique permet d'effectuer des combinaisons linéaires d'états quantiques différents directement au niveau du vecteur d'état lui-même ; ceci n'a rien à voir avec des combinaisons de probabilités, qui sont des fonctions quadratiques de ce vecteur d'état. En introduisant des corrélations directement au niveau des amplitudes de probabilités, on a accès à un niveau qui est en quelque sorte "en amont" de celui des pondérations linéaires des probabilités classiques ; les termes croisés entre ces amplitudes peuvent conduire à l'apparition de termes d'interférence quantique. Mais l'existence de ce niveau de combinaisons n'exclut pas d'y ajouter la notion de probabilités classiques. C'est pourquoi, en second lieu, on peut aussi en mécanique quantique supposer que l'état du système total n'est connu que de façon probabiliste, de sorte que les deux niveaux de probabilités peuvent coexister. Pour finir, il est clair que la notion de corrélation quantique est bien plus riche qu'en physique classique².

2-b. Monogamie quantique

Une autre propriété purement quantique est que, si un système physique A est fortement intriqué avec un système physique B , il ne peut être fortement intriqué avec un système C . Une telle propriété n'a guère d'équivalent en théorie classique, où évidemment rien n'empêche de corrélérer un troisième système C à deux autres A et B sans pour autant détruire leur corrélation initiale. On donne souvent le nom de "monogamie de l'intrication" à cette propriété quantique.

Supposons par exemple que deux spins soient dans un état du même type que l'état singulet (B-1) du Chapitre XXI :

$$|\Psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|A : +; B : -\rangle + e^{i\xi} |A : -; B : +\rangle] \quad (18)$$

(l'état singulet est obtenu pour $\xi = \pi$). Comment faire alors pour ajouter un spin supplémentaire sans détruire la corrélation entre les deux premiers ? On peut sup-

2. Dans le § 3, nous introduirons un critère (négativité des coefficients du développement de l'opérateur densité total en somme de produits) qui permet d'affirmer que les corrélations entre deux sous-systèmes sont de nature fondamentalement quantique.

poser que l'état des trois spins est :

$$\begin{aligned} |\Psi_{ABC}\rangle &= |\Psi_{AB}\rangle \otimes |C : \theta\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|A : +; B : -; C : \theta\rangle + e^{i\xi} |A : -; B : +; C : \theta\rangle] \end{aligned} \quad (19)$$

où $|\theta\rangle$ est un état normé quelconque pour le troisième spin. Ce ket préserve visiblement la même intrication entre les spins A et B que l'état (18), mais le troisième spin est alors totalement décorrélié avec les deux premiers.

Une autre possibilité est de prendre comme vecteur d'état :

$$|\Psi_{ABC}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|A : +; B : -; C : \theta_1\rangle + e^{i\xi} |A : -; B : +; C : \theta_2\rangle] \quad (20)$$

L'opérateur densité ρ_{AB} qui décrit alors les spins A et B est obtenu par la trace partielle (Complément E_{III}, § 5.b) :

$$\rho_{AB} = \text{Tr}_C \{ |\Psi_{ABC}\rangle \langle \Psi_{ABC}| \} \quad (21)$$

Le calcul des éléments de matrice de cette trace partielle montre que :

$$\begin{aligned} \rho_{AB} = \frac{1}{2} [&\langle \theta_1 | \theta_1 \rangle |A : +; B : -\rangle \langle A : +; B : -| \\ &+ \langle \theta_2 | \theta_2 \rangle |A : -; B : +\rangle \langle A : -; B : +| \\ &+ e^{i\xi} \langle \theta_1 | \theta_2 \rangle |A : -; B : +\rangle \langle A : +; B : -| \\ &+ e^{-i\xi} \langle \theta_2 | \theta_1 \rangle |A : +; B : -\rangle \langle A : -; B : +|] \end{aligned} \quad (22)$$

Nous pouvons alors distinguer plusieurs cas :

– Si $|\theta_1\rangle = |\theta_2\rangle$, on retombe sur (19), et le troisième spin n'est pas intriqué avec les deux premiers. L'opérateur densité ρ_{AB} est alors :

$$\begin{aligned} \rho_{AB} = \frac{1}{2} [&|A : +; B : -\rangle \langle A : +; B : -| + |A : -; B : +\rangle \langle A : -; B : +| \\ &+ e^{i\xi} |A : -; B : +\rangle \langle A : +; B : -| + e^{-i\xi} |A : +; B : -\rangle \langle A : -; B : +|] \end{aligned} \quad (23)$$

qui est simplement le projecteur sur l'état (18) et conserve toute l'intrication des spins A et B .

– Le cas opposé est celui où $|\theta_1\rangle$ et $|\theta_2\rangle$ sont orthogonaux, de sorte que $|\Psi_{ABC}\rangle$ devient un état dit GHZ (Greenberger, Horne et Zeilinger ; cf. Complément B_{XXI}) :

$$|\Psi_{GHZ}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|A : +; B : -; C : +\rangle + e^{i\xi} |A : -; B : +; C : -\rangle] \quad (24)$$

où, quand l'on passe d'une composante à l'autre, les trois spins passent d'un état donné à un état orthogonal. La seconde ligne de (22) s'annule alors, et la trace partielle ρ_{AB} devient :

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2} [|A : +; B : -\rangle \langle A : +; B : -| + |A : -; B : +\rangle \langle A : -; B : +|] \quad (25)$$

qui est un mélange statistique de deux possibilités avec des probabilités $1/2$: soit les deux spins sont dans l'état $|A : +; B : -\rangle$, soit ils sont dans l'état $|A : -; B : +\rangle$. Les cohérences quantiques entre ces deux états (termes dépendant de la phase ξ) ont totalement disparu. La corrélation entre les deux spins A et B est donc de nature classique³, et ne met en jeu aucune intrication.

– Dans la situation intermédiaire où $|\theta_1\rangle$ et $|\theta_2\rangle$ ne sont ni parallèles, ni orthogonaux, on constate sur (22) qu'il subsiste une certaine cohérence (éléments non diagonaux). Plus $|\theta_1\rangle$ et $|\theta_2\rangle$ sont parallèles, plus l'opérateur densité partiel reste semblable à celui des deux spins initiaux qui restent intriqués, mais moins le troisième l'est ; inversement, plus ils sont orthogonaux, plus les deux spins initiaux perdent leur corrélation pour la transmettre entièrement au niveau des trois spins.

Il s'agit là d'une propriété générale : si deux systèmes physiques sont maximalement intriqués, un principe d'exclusion mutuelle rend impossible de les intriquer à un troisième système. Mathématiquement, cette propriété s'exprime par l'inégalité de Coffman-Kundu-Wootters [69].

3. Séparabilité

Dans le point de vue de Bohr (§ F-22 du Chapitre XXI), il faut renoncer à la notion de séparabilité : même lorsque deux sous-systèmes physiques sont très séparés dans l'espace, ce n'est pas suffisant pour en conclure qu'il est possible de leur attribuer séparément des propriétés physiques (comme le font EPR) ; seul le système total, y compris les appareils de mesure, possède de telles propriétés. D'autre part, nous avons vu au § 2 qu'en mécanique quantique il existe deux façons d'introduire des corrélations entre deux systèmes : une façon classique (en supposant qu'ils ont des probabilités données de se trouver dans tels et tels états individuels corrélés), et une façon quantique (en supposant l'existence d'une intrication directement au niveau d'un vecteur d'état commun). Bien évidemment, s'il existe certaines situations où la mécanique quantique prédit des violations des inégalités de Bell, et donc du réalisme local, il en existe beaucoup d'autres où ses prédictions sont conformes à ces inégalités ; en un sens, une violation est la signature d'une situation ultra-quantique. Il est donc intéressant de rechercher un critère qui permette de faire la distinction entre les deux types de corrélations.

3-a. Opérateur densité séparable

Considérons un système total décrit par un opérateur densité ρ_{A+B} et constitué de deux sous-systèmes A et B . Supposons que ρ_{A+B} puisse se développer en fonction d'une série d'opérateurs densité ρ_A^n et ρ_B^n relatifs à chacun des deux sous-systèmes, avec des coefficients π_n réels positifs assimilables à des probabilités (donc de somme unité) :

$$\rho_{A+B} = \sum_n \pi_n \rho_A^n \otimes \rho_B^n \tag{26}$$

avec :

3. L'opérateur densité est séparable au sens qui sera défini au § 3, de sorte qu'il ne peut pas conduire à des violations des inégalités de Bell.

$$0 \leq \pi_n \leq 1 \quad \text{et} \quad \sum_n \pi_n = 1 \tag{27}$$

Intuitivement, on sent bien que les corrélations contenues dans ρ_{A+B} sont alors de nature classique : le système total est, avec une probabilité π_n , décrit par un opérateur densité qui est un produit sans corrélations d'opérateurs densité décrivant chacun des sous-systèmes. La façon dont sont introduites les corrélations entre ces propriétés reste donc classique, même si rien n'interdit à chacun des sous-systèmes de posséder des propriétés individuelles qui sont fortement quantiques.

Par définition, on dit que tout opérateur densité qui peut se décomposer selon (26) avec des coefficients π_n positifs est "séparable" [70, 71]. En revanche, si tout développement de ρ_{A+B} tel que (26) comporte nécessairement des coefficients π_n autres que réels positifs, on dit que l'opérateur densité ρ_{A+B} n'est pas séparable et qu'il contient de l'intrication quantique. Lorsqu'il est séparable, le système total $A + B$ ne peut jamais conduire à des violations des inégalités de Bell par mesure des corrélations entre propriétés physiques des deux sous-systèmes A et B . Les violations des inégalités de Bell sont donc un signe indiscutable du caractère non séparable de l'opérateur densité.

Démonstration

Pour le montrer, supposons que l'on effectue deux mesures simultanées sur les systèmes A et B , la première dépendant du paramètre de mesure a , la seconde du paramètre de mesure b . Nous notons $P_a(R_A)$ le projecteur agissant dans l'espace des états de A qui correspond à l'observation du résultat R_A (ce projecteur est la somme des projecteurs sur les vecteurs propres associés à cette mesure); de même, nous notons $P_b(R_B)$ le projecteur dans l'espace des états de B qui correspond à l'observation du résultat R_B . Lorsque le système total est décrit par l'opérateur densité (26), la probabilité d'obtenir les deux résultats conjoints R_A et R_B est :

$$\mathcal{P}(R_A, R_B) = \sum_n \pi_n \mathcal{P}_a^n(R_A) \times \mathcal{P}_b^n(R_B) \tag{28}$$

avec :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_a^n(R_A) &= \text{Tr}_A \{ \rho_A^n P_a(R_A) \} \\ \mathcal{P}_b^n(R_B) &= \text{Tr}_B \{ \rho_B^n P_b(R_B) \} \end{aligned} \tag{29}$$

Comme tous les nombres figurant au second membre de (28) sont positifs, cette égalité s'interprète de façon naturelle en physique classique ; à partir de maintenant, nous raisonnons donc dans ce cadre. Il apparaît deux niveaux de probabilités : en premier lieu, le système total est préparé avec des probabilités π_n dans un état où les deux sous-systèmes sont incorrélés ; en second lieu, pour chaque valeur de n les états individuels des sous-systèmes ne sont connus que de façon statistique, seules étant connues à l'avance la probabilité $\mathcal{P}_a^n(R_A)$ d'un résultat R_A et la probabilité $\mathcal{P}_b^n(R_B)$ d'un résultat R_B .

Montrons alors que, si une relation du type (28) est vérifiée pour tous les paramètres de mesure a et b , avec des probabilités positives quelconques $\mathcal{P}_a^n(R_A)$ et $\mathcal{P}_b^n(R_B)$, et avec des π_n qui sont eux aussi tous positifs, les inégalités de Bell sont toujours satisfaites. Nous supposons que les deux résultats R_A et R_B valent ± 1 . Dans un premier temps, supposons que les propriétés physiques de chaque paire de systèmes

A et B dépendent d'une variable aléatoire classique μ ; cette variable prend une série de valeurs μ_n correspondant aux termes dans la somme sur n de (28), chacune avec la probabilité π_n . Cette somme sur n s'interprète alors comme une valeur moyenne sur la variable aléatoire μ .

Puis, dans un second temps, supposons que les propriétés du système classique A dépendent d'une autre variable aléatoire ν_A , qui détermine le résultat de la mesure effectuée sur A . On peut par exemple supposer que ν_A est équipartie sur le segment $[0, 1]$ et que le résultat R_A est une fonction de ν_A qui prend la valeur $+1$ sur une partie du segment de longueur $\mathcal{P}_a^n (R_A = +1)$, la valeur -1 sur le reste du segment. La fonction ainsi définie reproduit la probabilité de la première ligne de (29) ; le résultat de mesure apparaît alors comme une fonction de ν_A , du paramètre de mesure a , et enfin de μ (qui remplace n). De plus, nous introduisons une troisième variable ν_B qui détermine le résultat de la mesure effectuée sur B , avec une distribution qui reproduit de façon semblable la probabilité de la seconde ligne de (29), pour tout n et tout choix du paramètre de mesure b .

Si enfin nous regroupons les trois variables μ , ν_A et ν_B en les considérant comme les trois composantes d'une seule variable λ , nous reproduisons exactement les hypothèses du début du § F-3-a du Chapitre XXI : les résultats de mesure sont des fonctions, l'un de λ et de a , l'autre de λ et de b . Le même raisonnement permet alors d'établir les inégalités de Bell. On peut remarquer que, à aucun stade de ce raisonnement classique, il n'a été indispensable de considérer l'ensemble $A + B$ comme un tout ; il est donc naturel que les inégalités de Bell puissent être établies dans ce cas.

3-b. Deux spins dans un état singulet

Revenons à l'exemple de deux spins $1/2$ dans un état singulet :

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|+, -\rangle - |-, +\rangle \right] \tag{30}$$

Dans la base des 4 kets $|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle$ pris dans cet ordre, la matrice représentant l'opérateur densité ρ_{A+B} est alors :

$$(\rho_{A+B}) = |\Psi\rangle \langle\Psi| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{31}$$

La matrice densité (ρ_{A+B}) possède donc des éléments non diagonaux entre états $|+, -\rangle$ et $|-, +\rangle$, par exemple :

$$-1 = \langle +, - | \rho_{A+B} | -, + \rangle \tag{32}$$

Pour les reproduire par une somme de produits telle que (26), nous devons avoir :

$$-1 = \sum_n \pi_n \langle + | \rho_A^n | - \rangle \otimes \langle - | \rho_B^n | + \rangle \tag{33}$$

Cela nécessite que l'on introduise au moins un terme n comprenant des opérateurs densité partiels ρ_A^n et ρ_B^n qui ont tous deux des éléments non diagonaux. Mais chacun de ces deux opérateurs est défini positif. Pour ρ_A^n par exemple, il doit avoir des populations (éléments de matrice diagonaux) $\langle + | \rho_A^n | + \rangle$ et $\langle - | \rho_A^n | - \rangle$ sur les deux

états individuels de spin, et de même pour ρ_B^n . Le terme n correspondant introduit donc nécessairement pour (ρ_{A+B}) des populations sur les 4 états $|+, +\rangle$, $|+, -\rangle$, $|-, +\rangle$, $|-, -\rangle$; mais il sera ensuite impossible d'annuler ces populations par ajout d'autres produits d'opérateurs densité (dont les populations sont positives) avec des coefficients π_n positifs. Cet opérateur densité (ρ_{A+B}) est donc non séparable, et c'est pourquoi il peut conduire à des violations des inégalités de Bell.

Complément B_{XXI}

Etats GHZ, échange d'intrication

1	Désaccord de signe dans un état GHZ	663
1-a	Calcul quantique	663
1-b	Raisonnement dans le cadre du réalisme local	666
1-c	Discussion; contextualité	667
2	Échange d'intrication	668
2-a	Schéma général	668
2-b	Discussion	671

Greenberger, Horne et Zeilinger (GHZ) ont montré en 1989 [72, 73] que des systèmes contenant plus de deux particules corrélées pouvaient présenter des violations du réalisme local qui sont encore plus spectaculaires que celles des inégalités de Bell. Ces violations mettent en effet en jeu une contradiction de signe (donc une violation de 100 %) pour des corrélations parfaites entre résultats de mesure, au lieu d'inégalités violées de 40 % pour des corrélations imparfaites. Le § 1 est consacré à une discussion de ces violations, dont l'observation demande la création d'une intrication initiale entre trois particules ou plus. Au § 2, nous discuterons ensuite un autre exemple mettant en jeu l'intrication de plus de deux particules, la méthode de l'échange d'intrication ("*entanglement swapping*"). Cette dernière met en lumière une propriété étonnante de l'intrication : la possibilité d'intriquer entre eux des systèmes quantiques sans faire intervenir aucune interaction entre eux.

1. Désaccord de signe dans un état GHZ

Nous allons supposer que le système étudié est constitué de trois spins 1/2; c'est le cas le plus simple permettant d'exposer le mécanisme d'apparition des contradictions GHZ.

1-a. Calcul quantique

Le système de trois spins est décrit par l'état quantique normé :

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|+, +, +\rangle + \eta |-, -, -\rangle \right] \quad (1)$$

Dans cette égalité, les états $|\pm\rangle$ symbolisent les états propres des composantes des spins le long de l'axe Oz d'un repère orthonormé $Oxyz$; pour alléger la notation du ket à trois particules, les spins ne sont pas numérotés : le premier signe correspond à l'état du premier spin, le second à celui du second, et de même pour le troisième spin. Le nombre η désigne, soit +1, soit -1. Nous cherchons maintenant les probabilités quantiques des résultats obtenus en effectuant des mesures des composantes

de chacun des spins $\sigma_{1,2,3}$ des trois particules selon deux directions : soit le long de la direction Ox , soit de la direction perpendiculaire Oy (Fig. 1).

Commençons par considérer une mesure du produit $\sigma_{1y} \times \sigma_{2y} \times \sigma_{3x}$. Il se trouve que $|\Psi\rangle$ est un vecteur propre de ce produit d'opérateurs avec la valeur propre $-\eta$, de sorte que le résultat est certain. En effet, le premier opérateur donne¹ :

$$\begin{aligned} \sigma_{3x} |\Psi\rangle &= \frac{1}{2} [\sigma_+ (3) + \sigma_- (3)] |\Psi\rangle \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}} [\eta\sigma_+ (3) |-, -, -\rangle + \sigma_- (3) |+, +, +\rangle] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\eta |-, -, +\rangle + |+, +, -\rangle] \end{aligned} \quad (2)$$

puis l'action du second s'écrit :

$$\begin{aligned} \sigma_{2y}\sigma_{3x} |\Psi\rangle &= \frac{1}{2i} [\sigma_+ (2) - \sigma_- (2)] \sigma_{3x} |\Psi\rangle \\ &= \frac{1}{i\sqrt{2}} [\eta |-, +, +\rangle - |+, -, -\rangle] \end{aligned} \quad (3)$$

et enfin le produit des trois opérateurs donne :

$$\begin{aligned} \sigma_{1y}\sigma_{2y}\sigma_{3x} |\Psi\rangle &= \frac{1}{2i} [\sigma_+ (1) - \sigma_- (1)] \sigma_{2y}\sigma_{3x} |\Psi\rangle \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} [\eta |+, +, +\rangle + |-, -, -\rangle] \\ &= -\eta |\Psi\rangle \end{aligned} \quad (4)$$

La probabilité du résultat $-\eta$ est donc :

$$\mathcal{P}(\sigma_{1y} \times \sigma_{2y} \times \sigma_{3x} \implies -\eta) = 1 \quad (5)$$

tandis que la probabilité $\mathcal{P}(\sigma_{1y} \times \sigma_{2y} \times \sigma_{3x} \implies +\eta)$ de l'autre résultat est nulle.

Comme les trois spins jouent le même rôle, il est clair que $|\Psi\rangle$ est également un vecteur propre des deux produits d'opérateurs $\sigma_{1x} \times \sigma_{2y} \times \sigma_{3y}$ et $\sigma_{1y} \times \sigma_{2x} \times \sigma_{3y}$, avec les valeurs propres $-\eta$. Les probabilités correspondantes sont donc :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\sigma_{1x} \times \sigma_{2y} \times \sigma_{3y} \implies -\eta) &= 1 \\ \mathcal{P}(\sigma_{1y} \times \sigma_{2x} \times \sigma_{3y} \implies -\eta) &= 1 \end{aligned} \quad (6)$$

Les trois produits prennent donc tous la valeur $-\eta$ avec certitude.

Supposons enfin que l'on mesure le produit des composantes des trois spins le long de l'axe Ox . Nous utilisons à nouveau (2), mais (3) est maintenant remplacé par :

$$\begin{aligned} \sigma_{2x}\sigma_{3x} |\Psi\rangle &= \frac{1}{2} [\sigma_+ (2) + \sigma_- (2)] \sigma_{3x} |\Psi\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\eta |-, +, +\rangle + |+, -, -\rangle] \end{aligned} \quad (7)$$

1. Les matrices de Pauli sont définies au Complément A_{IV} ; les opérateurs $\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$ sont tels que $\sigma_{\pm} |\mp\rangle = 2|\pm\rangle$.

et (4) par :

$$\begin{aligned} \sigma_{1x}\sigma_{2x}\sigma_{3x}|\Psi\rangle &= \frac{1}{2}[\sigma_+(1) + \sigma_-(1)]\sigma_{2x}\sigma_{3x}|\Psi\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\eta|+, +, +\rangle + |-, -, -\rangle] \end{aligned} \tag{8}$$

Nous constatons ainsi que $|\Psi\rangle$ est également un état propre de l'opérateur produit $\sigma_{1x} \times \sigma_{2x} \times \sigma_{3x}$, mais cette fois avec la valeur propre $+\eta$. Il en découle que :

$$\mathcal{P}(\sigma_{1x} \times \sigma_{2x} \times \sigma_{3x} \implies +\eta) = 1 \tag{9}$$

Pour cette mesure de produit, le résultat prend donc avec certitude la valeur $+\eta$.

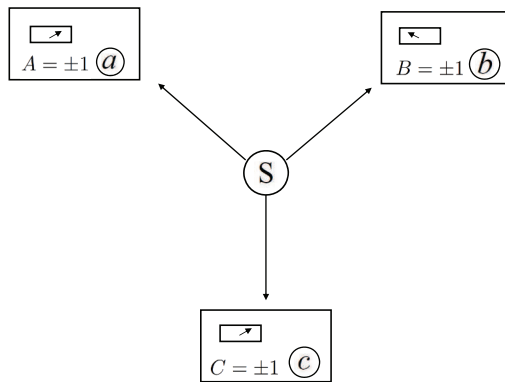


FIGURE 1 – Schéma d’une expérience permettant d’observer les contradictions GHZ. Trois spins dans l’état initial $|\Psi\rangle$ écrit en (1) subissent des mesures en trois régions différentes de l’espace. Dans chacune d’entre elles se trouve un appareil de mesure, muni d’un bouton de réglage permettant à l’expérimentateur local de choisir entre deux mesures de composantes du spin, soit le long de Ox , soit le long de Oy . Quels que soient les trois choix, les résultats fournis par les trois appareils sont $A = \pm 1$, $B = \pm 1$ et $C = \pm 1$.

Mesure d’un produit d’opérateurs qui commutent en mécanique quantique :

Trois opérateurs agissant sur des spins différents tels que σ_{1y} , σ_{2y} et σ_{3x} commutent entre eux ; ils constituent même un ECOC (ensemble complet d’observables qui commutent) dans l’espace des états des trois spins. On peut donc construire une base de vecteurs propres communs aux trois opérateurs $|\xi_1, \xi_2, \xi_3\rangle$ repérés par la valeur propre $\xi_1 = \pm 1$ de σ_{1y} , la valeur propre $\xi_2 = \pm 1$ de σ_{2y} et la valeur propre $\xi_3 = \pm 1$ de σ_{3x} . Tout vecteur $|\Psi\rangle$ se décompose sur cette base selon :

$$|\Psi\rangle = \sum_{\xi_1, \xi_2, \xi_3} c(\xi_1, \xi_2, \xi_3) |\xi_1, \xi_2, \xi_3\rangle \tag{10}$$

L'effet du produit d'opérateurs $\sigma_{1y}\sigma_{2y}\sigma_{3x}$ sur un ket quelconque est de simplement multiplier chacune de ses composantes $c(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ par le produit $\xi_1 \times \xi_2 \times \xi_3$. Mais le vecteur $|\Psi\rangle$ écrit en (1) est vecteur propre du produit d'opérateurs, avec la valeur propre $-\eta$. L'unicité de la décomposition (10) entraîne alors que les seuls coefficients $c(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ non nuls sont ceux pour lesquels :

$$\xi_1 \times \xi_2 \times \xi_3 = -\eta \quad (11)$$

Supposons maintenant que l'on mesure la composante σ_{1y} du premier spin. Le résultat $\xi_1 = \pm 1$ est aléatoire. Le postulat de projection conduit à un vecteur d'état qui dépend de ce résultat, obtenu en ne retenant dans (1) que la moitié des composantes (celles qui correspondent à la valeur de ξ_1 observée). Les composantes du vecteur d'état projeté satisfont donc toujours la relation (11), où ξ_1 est maintenant fixé. De même, si l'on mesure σ_{2y} pour le second spin, le résultat $\xi_2 = \pm 1$ est lui aussi aléatoire, mais les composantes du nouveau vecteur d'état projeté satisfont toujours cette même relation. Comme ξ_1 et ξ_2 sont maintenant connus, il en est donc de même de ξ_3 , dont la valeur est déterminée par les deux premières mesures.

Pour finir, les résultats observés pour chaque mesure de spin fluctuent d'une réalisation à la suivante de l'expérience, mais ces fluctuations sont corrélées de sorte que le produit des trois résultats reste constant. Bien évidemment, la même analyse s'applique aux trois autres ensembles d'opérateurs considérés plus haut, σ_{1x} , σ_{2y} et σ_{3y} par exemple.

1-b. Raisonnement dans le cadre du réalisme local

Quittons pour un instant la mécanique quantique standard et examinons quelles seraient les prédictions d'une théorie réaliste locale (au sens de EPR) dans ce type de situation. Puisque nous sommes dans le cas particulièrement simple où l'état quantique initial est un état propre de toutes les observables considérées (tous les résultats sont certains), on pourrait s'attendre à ce que rien de particulier ne se produise. Or nous allons voir qu'une contradiction complète apparaît entre réalisme local et prédictions de la mécanique quantique.

Le raisonnement réaliste local est une généralisation directe de celui que nous avons effectué pour obtenir les inégalités de Bell dans le § F-3-a du Chapitre XXI. Nous remarquons d'abord que les corrélations parfaites impliquent que le résultat d'une mesure d'une composante le long de Ox (ou Oy) du spin d'une particule quelconque peut être déduit de résultats de mesures effectuées sur d'autres particules à une distance arbitrairement grande. Donc le raisonnement EPR montre l'existence d'éléments de réalité correspondant à ces deux composantes, éléments que nous notons $A_{x,y} = \pm 1$ pour le premier spin, $B_{x,y} = \pm 1$ pour le second, et enfin $C_{x,y} = \pm 1$ pour le troisième. Selon le raisonnement EPR, pour chaque réalisation de l'expérience (chaque émission d'un trio de particules par une source), ces six nombres ont des valeurs bien déterminées, mêmes si elles sont a priori inconnues. Ces nombres sont tout simplement les résultats que vont donner les mesures éventuelles qui peuvent être effectuées ultérieurement. Par exemple, une mesure sur le premier spin va nécessairement donner A_x si la direction d'analyse est choisie le long de Ox , ou A_y si elle l'est le long de Oy , indépendamment du type de mesures effectuées sur les deux autres spins.

Un accord avec les trois égalités (5) et (6) impose alors que :

$$\begin{aligned} A_y B_y C_x &= -\eta \\ A_x B_y C_y &= -\eta \\ A_y B_x C_y &= -\eta \end{aligned} \tag{12}$$

Cependant, dans le cadre du réalisme local, les mêmes valeurs A , B et C peuvent être utilisées pour l'expérience où les trois composantes le long de Ox sont mesurées : le résultat est simplement le produit $A_x B_x C_x$. Mais, comme les carrés des nombres A_y^2 , etc., sont toujours égaux à $+1$, nous pouvons obtenir le même résultat en multipliant les trois lignes de (12), ce qui donne :

$$A_x B_x C_x = -\eta \tag{13}$$

C'est là que la contradiction apparaît : l'égalité (9) prédit que la mesure de $\sigma_{1x} \times \sigma_{2x} \times \sigma_{3x}$ doit toujours donner le résultat $+\eta$, qui a le signe opposé ! La contradiction entre les prédictions du réalisme local et celles de la mécanique quantique ne peut pas être plus marquée.

1-c. Discussion ; contextualité

Par rapport aux violations des inégalités de Bell, la contradiction GHZ semble encore plus spectaculaire du fait qu'une contradiction de 100 % est obtenue avec une certitude de 100 %. Mais d'un point de vue expérimental, bien évidemment, la nécessité de mettre en jeu trois particules éloignées et intriquées complique les choses.

Pour pouvoir commodément identifier les trois spins (quelle mesure est attribuée au spin noté A , au spin noté B , et au spin noté C), et pour assurer que les mesures soient éloignées, supposons qu'ils occupent trois régions différentes de l'espace. Lorsque les variables spatiales sont prises en compte, le ket (1) symbolise alors un ket qui peut être écrit plus explicitement sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |1 : u_a\rangle |2 : u_b\rangle |3 : u_c\rangle \\ &\otimes \left[|1 : +; 2 : +; 3 : +\rangle + \eta |1 : -; 2 : -; 3 : -\rangle \right] \end{aligned} \tag{14}$$

où $|u_{a,b,c}\rangle$ sont trois états orbitaux dont les fonctions d'onde ne se recouvrent pas. Elles peuvent par exemple être entièrement localisées dans des boîtes séparées où sont effectuées les mesures. On suppose alors qu'aucune des trois particules n'échappe à la mesure et que chacune d'entre elles est observée séparément. La procédure expérimentale consiste alors à commencer par choisir une composante, Ox ou Oy pour chaque boîte, puis à réaliser les trois mesures correspondantes, d'obtenir les trois résultats $A_{x,y}$, $B_{x,y}$ et $C_{x,y}$, et enfin à calculer leur produit.

Une première vérification indispensable est d'effectuer un grand nombre de réalisations de l'expérience pour mesurer successivement les trois produits $A_y B_y C_x$, $A_x B_y C_y$ et $A_y B_x C_y$, afin de s'assurer que les corrélations parfaites prédites par la mécanique quantique sont bien observées (c'est essentiel pour le raisonnement EPR, qui permet de déduire l'existence de 6 éléments de réalité séparés). Alors on mesure le produit $A_x B_x C_x$ et, si la mécanique quantique continue à donner des prédictions

correctes, on obtient le signe opposé ; la conclusion est alors que le réalisme local est violé. Ou, de façon équivalente, on peut conclure que la valeur obtenue en mesurant, par exemple, σ_{1x} dépend de la composante Ox ou Oy qui est mesurée pour les autres spins, même si les opérateurs correspondants commutent avec σ_{1x} . On arrive alors à la notion générale de “contextualité quantique” : dans une expérience où plusieurs observables qui commutent sont mesurées, selon la prescription de Bohr il faut prendre en compte l’ensemble du dispositif expérimental (l’ensemble du contexte où est placé le système à mesurer) ; il ne serait pas correct de raisonner comme si ces mesures étaient des processus indépendants.

Des tests expérimentaux des égalités GHZ ont été réalisés [74, 75]. Ces expériences demandent que trois particules soient mises dans l’état quantique (14), ce qui assurément n’est pas une tâche triviale. Néanmoins, grâce à des techniques élaborées d’optique quantique, l’exactitude des prédictions de la mécanique quantique a effectivement été vérifiée dans ce cas, avec des expériences à 3 et 4 photons intriqués, ainsi que par des techniques de RMN (résonance magnétique nucléaire).

2. Échange d’intrication

La méthode que nous allons décrire maintenant porte en anglais le nom de “*entanglement swapping*”, que l’on peut traduire en français par “échange d’intrication”. Cette méthode permet d’intriquer des particules provenant de sources indépendantes (qui n’ont donc aucun passé commun) sous l’effet de la mesure quantique.

2-a. Schéma général

Supposons que l’on dispose de deux sources S_{12} et S_{34} créant chacune une paire de photons intriqués (Fig. 2). La première crée un photon d’impulsion \mathbf{k}_1 et un autre d’impulsion \mathbf{k}_2 dont les polarisations sont intriquées dans des états H (polarisation horizontale, dans le plan de la figure) et V (polarisation verticale, perpendiculaire au plan de figure). De même, la seconde source crée un photon d’impulsion \mathbf{k}_3 et autre d’impulsion \mathbf{k}_4 dont les polarisations sont intriquées de la même façon. L’état initial décrivant les deux paires est le produit tensoriel de deux états à deux particules chacun :

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} [|\mathbf{k}_1, H; \mathbf{k}_2, V\rangle + |\mathbf{k}_1, V; \mathbf{k}_2, H\rangle] \otimes [|\mathbf{k}_3, H; \mathbf{k}_4, V\rangle + |\mathbf{k}_3, V; \mathbf{k}_4, H\rangle] \quad (15)$$

Si les deux photons émis par une source donnée sont fortement intriqués, aucune intrication n’existe donc entre les deux couples de photons émis par chacune des deux sources. Il est commode d’introduire les quatre états suivants relatifs aux vecteurs d’onde $\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j$:

$$\begin{aligned} |\Phi_{i,j}^B\rangle_{(\eta)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\mathbf{k}_i, H; \mathbf{k}_j, H\rangle + \eta |\mathbf{k}_i, V; \mathbf{k}_j, V\rangle] \\ |\Theta_{i,j}^B\rangle_{(\eta)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\mathbf{k}_i, H; \mathbf{k}_j, V\rangle + \eta |\mathbf{k}_i, V; \mathbf{k}_j, H\rangle] \end{aligned} \quad (16)$$

avec, ici aussi, $\eta = \pm 1$. Ces états (souvent appelés “états de Bell” dans la littérature, d’où l’indice B) fournissent une base orthonormée de l’espace des états associé aux

particules i et j . On vérifie alors (le calcul est sans difficulté particulière mais un peu lourd, de sorte que nous ne le détaillons pas) que :

$$|\Phi_{1,4}^B\rangle_{(+1)} \otimes |\Phi_{2,3}^B\rangle_{(+1)} - |\Phi_{1,4}^B\rangle_{(-1)} \otimes |\Phi_{2,3}^B\rangle_{(-1)} = |H; V; V; H\rangle + |V; H; H; V\rangle \quad (17)$$

(pour simplifier l'écriture, dans le second membre nous supposons implicitement que l'ordre des impulsions des particules est toujours $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$ et \mathbf{k}_4) et que :

$$|\Theta_{1,4}^B\rangle_{(+1)} \otimes |\Theta_{2,3}^B\rangle_{(+1)} - |\Theta_{1,4}^B\rangle_{(-1)} \otimes |\Theta_{2,3}^B\rangle_{(-1)} = |H; V; H; V\rangle + |V; H; V; H\rangle \quad (18)$$

Nous pouvons donc écrire l'état (15) sous la forme :

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} \left[|\Phi_{1,4}^B\rangle_{(+1)} \otimes |\Phi_{2,3}^B\rangle_{(+1)} - |\Phi_{1,4}^B\rangle_{(-1)} \otimes |\Phi_{2,3}^B\rangle_{(-1)} + |\Theta_{1,4}^B\rangle_{(+1)} \otimes |\Theta_{2,3}^B\rangle_{(+1)} - |\Theta_{1,4}^B\rangle_{(-1)} \otimes |\Theta_{2,3}^B\rangle_{(-1)} \right] \quad (19)$$

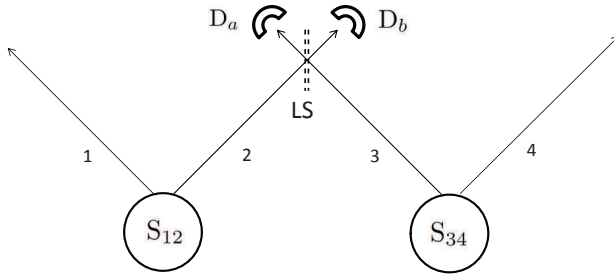


FIGURE 2 – Schéma de principe de la méthode d'échange d'intrication (“entanglement swapping”). Deux sources S_{12} et S_{34} émettent chacune une paire de particules intriquées, de vecteurs d'onde \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 pour la première, \mathbf{k}_3 et \mathbf{k}_4 pour la seconde. Ces sources sont indépendantes. Une lame semi-réfléchissante LS est insérée sur la trajectoire des particules \mathbf{k}_2 et \mathbf{k}_3 ; elle est suivie de deux détecteurs D_a et D_b qui mesurent le nombre de particules dans les deux canaux de sortie a et b. L'effet de cette mesure est d'effectuer une projection du vecteur d'état qui met les deux particules \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_4 dans un état totalement intriqué, alors qu'elles n'ont jamais interagi.

La Figure 2 schématise l'expérience envisagée. Après émission, les particules d'impulsions \mathbf{k}_2 et \mathbf{k}_3 subissent une mesure mettant en jeu leur interférence. Pour cela, les deux particules sont envoyées sur une lame semi-réfléchissante LS ; après qu'elles l'aient traversée, des détecteurs D_a et D_b mesurent dans quels canaux de sortie sont trouvées les particules. Si l'on observe deux particules sortant dans des

canaux de sortie différents, le vecteur propre correspondant à ce résultat de mesure est l'état $|\Theta_{23}^B\rangle_{(-1)}$; nous montrons en effet ci-dessous que les trois autres états $|\Theta_{2,3}^B\rangle_{(+1)}$, $|\Phi_{2,3}^B\rangle_{(+1)}$ et $|\Phi_{2,3}^B\rangle_{(-1)}$ correspondent à des situations où les deux particules sortent toujours dans le même canal de sortie. La mesure projette alors l'état (19) sur la dernière de ses quatre composantes. La conséquence immédiate est que, si les deux particules d'impulsions \mathbf{k}_2 et \mathbf{k}_3 sortent par des canaux différents (ce qui se produit une fois sur quatre), les deux particules d'impulsion \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_4 atteignent l'état $|\Theta_{1,4}^B\rangle_{(-1)}$. Ainsi, les deux particules non observées atteignent un état totalement intriqué, alors qu'elles sont arbitrairement éloignées. Il est remarquable que l'intrication initiale ne concerne que les deux particules \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 d'une part, et séparément les deux particules \mathbf{k}_3 et \mathbf{k}_4 ; mais, en effectuant une mesure appropriée sur une particule de chaque paire, on projette les deux particules restantes sur un état fortement intriqué, bien qu'elles n'aient interagi à aucune étape du processus.

Démonstration :

Montrons maintenant que $|\Theta_{23}^B\rangle_{(-1)}$ est un état initial des deux particules qui interfèrent pour lequel elles sortent toutes deux par des canaux différents. Introduisons pour cela les deux opérateurs de création $a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger$ et $a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger$ dans l'état individuel de vecteur d'onde \mathbf{k}_2 et de polarisation H ou V , ainsi que les deux opérateurs $a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger$ et $a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger$ dans l'état individuel de vecteur d'onde \mathbf{k}_3 et de polarisation H ou V . L'état $|\Theta_{23}^B\rangle_{(-1)}$ s'écrit :

$$|\Theta_{23}^B\rangle_{(-1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger - a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \right] |0\rangle \quad (20)$$

Au cours de la traversée de la lame, les polarisations ne sont pas modifiées, mais les vecteurs d'onde le sont. En termes des opérateurs de création, ceci induit les transformations unitaires :

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger &\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left[a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger + ia_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \right] \\ a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger &\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ia_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger + a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \right] \end{aligned} \quad (21)$$

où les facteurs i proviennent du changement de phase lors de la réflexion interne d'un faisceau lumineux. Des égalités semblables sont obtenues pour la polarisation V , de sorte que :

$$\begin{aligned} &a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger - a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \\ &\Rightarrow \frac{1}{2} \left[\left(a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger + ia_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \right) \left(ia_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger + a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger \right) \right. \\ &\quad \left. - \left(a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger + ia_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger \right) \left(ia_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger + a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \right) \right] \end{aligned} \quad (22)$$

Comme les opérateurs de création dans des modes différents commutent, cet opérateur est égal à :

$$\left[a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger - a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \right] \quad (23)$$

de sorte que l'état $|\Theta_{23}^B\rangle_{(-1)}$ se transforme selon :

$$|\Theta_{23}^B\rangle_{(-1)} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left[a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger - a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \right] |0\rangle \quad (24)$$

Nous constatons donc que, si l'état avant traversée de la lame est $|\Theta_{23}^B\rangle_{(-1)}$, après traversée de la lame les deux photons sont toujours dans des voies de sortie différentes.

Pour l'état $|\Theta_{2,3}^B\rangle_{(+1)}$, il faut remplacer (22) par :

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger + a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger &\Rightarrow \frac{1}{2} \left[\left(a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger + i a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \right) \left(i a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger + a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger + i a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger \right) \left(i a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger + a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \right) \right] \\ &= i \left[a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger + a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger \right] \end{aligned} \quad (25)$$

de sorte que les deux photons sortent toujours dans la même voie. De même, pour l'état $|\Phi_{2,3}^B\rangle_{(\pm 1)}$, l'opérateur qui apparaît est :

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \pm a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger &\Rightarrow \frac{1}{2} \left[\left(a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger + i a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \right) \left(i a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger + a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \right) \right. \\ &\quad \left. \pm \left(a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger + i a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger \right) \left(i a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger + a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger \right) \right] \\ &= i \left[\left(a_{\mathbf{k}_2,H}^\dagger \right)^2 + \left(a_{\mathbf{k}_3,H}^\dagger \right)^2 \pm \left(a_{\mathbf{k}_2,V}^\dagger \right)^2 \pm \left(a_{\mathbf{k}_3,V}^\dagger \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (26)$$

Dans tous les termes, on constate à nouveau que les deux photons empruntent la même voie de sortie. L'état $|\Theta_{23}^B\rangle_{(-1)}$ est donc bien le seul qui conduise à des photons dans des voies de sortie différentes.

2-b. Discussion

En physique classique aussi, il est possible d'obtenir des corrélations entre deux objets initialement indépendants, en opérant une sélection sur des autres objets avec lesquels chacun d'entre eux est corrélé. Pour mettre en évidence la différence fondamentale avec l'échange d'intrication, discutons maintenant une telle expérience classique. Supposons que deux sources indépendantes émettent des paires d'objets corrélés, numérotés 1 et 2 pour la première source, 3 et 4 pour la seconde, comme sur la figure 2. Pour chaque réalisation de l'expérience, chaque source émet deux objets classiques partageant une propriété commune (par exemple la même couleur, des moments angulaires opposés, etc.). Les deux sources sont cependant totalement incorrélées (les objets émis par deux sources différentes ne présentent aucune corrélation entre leurs couleurs, moments angulaires, etc.). Si toutefois on sélectionne les événements où les particules 2 et 3 présentent une certaine corrélation (par exemple couleurs identiques, couleurs différentes, moments angulaires parallèles ou antiparallèles, etc.), il est clair que les particules 1 et 4 seront également corrélées de la même façon, et ceci même si elles n'ont jamais interagi dans le passé. Ceci est juste une conséquence de la sélection opérée dans une distribution classique de probabilités, et pourrait s'appeler "échange de corrélations classiques".

Cependant, cette sélection reste purement classique ; aucune intrication n'est produite par cette méthode. Si une expérience de Bell est réalisée avec les objets 1 et 4, comme l'on reste dans le cadre de la physique classique, les corrélations obtenues satisferont nécessairement aux inégalités de Bell. En revanche, la méthode d'échange d'intrication permet de créer une intrication et d'obtenir de fortes violations de ces inégalités. Elle fournit donc une méthode pour créer des corrélations plus puissante que l'échange de corrélations classiques, et a été mise en œuvre dans plusieurs expériences [76, 77].

Conclusion

Les deux exemples que nous avons discutés illustrent la variété des situations dans lesquelles l'intrication quantique peut conduire à des effets physiques marqués, même lorsque les deux systèmes quantiques intriqués sont arbitrairement éloignés. Dans tous les cas, il est essentiel de bien suivre les règles de base de la mécanique quantique, et de n'effectuer les calculs qu'en termes du vecteur d'état total, qui englobe l'ensemble des systèmes physiques en question. Toute tentative d'effectuer des calculs séparés dans les différentes régions de l'espace, puis d'introduire des corrélations par un calcul de probabilités classiques, conduirait à des résultats dont de nombreux effets quantiques non locaux seraient éliminés, et en contradiction avec l'expérience.

Complément C_{XXI}

Emergence d'une phase relative sous l'effet de processus de détection

1	Probabilités des mesures de position simple, double, etc.	674
1-a	Mesure simple (une seule particule)	676
1-b	Mesure double (deux particules)	677
1-c	Généralisation : nombre quelconque de mesures de positions	678
2	Augmentation de l'intrication sous l'effet du processus de détection	679
2-a	Mesures de densité simple $\mathcal{P}(x_1)$	679
2-b	Intrication entre les deux modes après la première détection	680
2-c	Mesures de densité double $\mathcal{P}(x_2, x_1)$	680
2-d	Discussion physique	681
3	Détection d'un grand nombre de particules Q	681
3-a	Probabilité d'une séquence de détections multiples . . .	681
3-b	Discussion physique ; émergence d'une phase relative . .	684

Introduction

Par référence à la condensation de Bose-Einstein (Complément C_{XV}), on appelle “condensat” un système de bosons identiques occupant tous le même état individuel $|u_i\rangle$. Il est donc décrit par un état de Fock du type de celui écrit en (A-17) au Chapitre XV, et dont tous les nombres d'occupation sont nuls, sauf n_i qui prend une valeur très grande N :

$$|N : u_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} [a_{u_i}^\dagger]^N |0\rangle \tag{1}$$

où $a_{u_i}^\dagger$ est l'opérateur de création dans l'état individuel $|u_i\rangle$ et $|0\rangle$ l'état du vide (état où tous les nombres d'occupation sont nuls). De même, un “double condensat” est l'état de Fock obtenu en plaçant N_1 particules dans l'état individuel $|u_i\rangle$ et N_2 particules dans l'état individuel $|u_j\rangle$, donc l'état normé :

$$|\Phi_0\rangle = |N_1 : u_i; N_2 : u_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1!N_2!}} [a_{u_i}^\dagger]^{N_1} [a_{u_j}^\dagger]^{N_2} |0\rangle \tag{2}$$

Nous allons nous intéresser particulièrement au cas où les états individuels u_i et u_j sont des états de vecteurs d'onde bien définis et opposés $\pm k$:

$$|\Phi_0\rangle = |N_1 : +k; N_2 : -k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1!N_2!}} [a_{+k}^\dagger]^{N_1} [a_{-k}^\dagger]^{N_2} |0\rangle \tag{3}$$

Dans un tel état, les nombres d'occupation sont parfaitement définis, mais la phase relative des deux condensats est complètement indéterminée ; nous vérifierons d'ailleurs plus bas (§ 2-a) que, si l'on mesure la position d'une seule particule avec un tel état, aucune frange d'interférence n'est observable.

Or des expériences récentes [78] ont montré que, lorsque la position de nombreuses particules est mesurée, des franges d'interférence peuvent effectivement être observées dans la zone de recouvrement de deux condensats (Figure 1). Ceci reste vrai même lorsqu'ils ont été créés de façon complètement indépendante. La position des franges indique alors une valeur bien définie de la phase relative des deux condensats ; la question se pose alors immédiatement de comprendre l'origine de la phase observée. Le but de ce complément est d'étudier le mécanisme d'apparition de cette phase relative. Nous verrons qu'elle résulte de l'effet des détections successives des particules modifiant progressivement l'état initial : ces détections produisent une intrication entre les deux condensats, intrication qui croît au fur et à mesure que de plus en plus de particules sont détectées, et définit la phase relative de façon de plus en plus précise.

Pour une réalisation donnée de l'expérience, on observe des franges de position bien définie. Cependant, si l'on recommence l'expérience en préparant initialement les deux condensats de la même façon, c'est une nouvelle phase relative qui va apparaître lors du processus des mesures successives ; sa valeur est en général complètement différente de celle obtenue précédemment. Il en résulte que, si l'on effectue une moyenne des observations sur un grand nombre d'expériences indépendantes successives, les franges se brouillent et finissent par disparaître. L'effet d'apparition de la phase n'est donc clairement observable que lors d'une réalisation particulière de l'expérience.

Nous commençons, dans le § 1, par établir l'expression des probabilités de mesure de positions à une, deux et N particules ; nous montrons que ces probabilités sont proportionnelles à des fonctions de corrélations spatio-temporelles des opérateurs champ des diverses particules. Au § 2, nous montrons ensuite comment, partant d'un état initial des deux condensats qui est une simple juxtaposition de deux états de Fock, l'effet des mesures des positions des particules est de créer une intrication croissante entre les deux condensats. Une étude plus générale de l'évolution du système est présentée au § 3, permettant en particulier de montrer comment cette croissance de l'intrication s'accompagne de l'apparition d'une phase relative de mieux en mieux définie entre les deux condensats. Les calculs de ce complément sont limités au cas où le nombre de positions mesurées reste très faible devant le nombre total des particules formant les condensats ; dans le Complément D_{XXI}, nous nous affranchirons de cette hypothèse.

1. Probabilités des mesures de position simple, double, etc.

Nous supposons donc que l'on procède à la mesure successive des positions des particules. Nous évaluons la probabilité de trouver la première particule dans un intervalle¹ de longueur infinitésimale Δ autour de la position $x = x_1$, puis celle de trouver ensuite une seconde particule dans un intervalle de même longueur Δ autour

1. Pour simplifier l'écriture, nous considérons ici un problème à une dimension et notons les positions x_1, x_2, \dots, x_p . L'extension à trois dimensions ne présente aucune difficulté : il suffit de remplacer tous les x_i par des vecteurs \mathbf{r}_i .

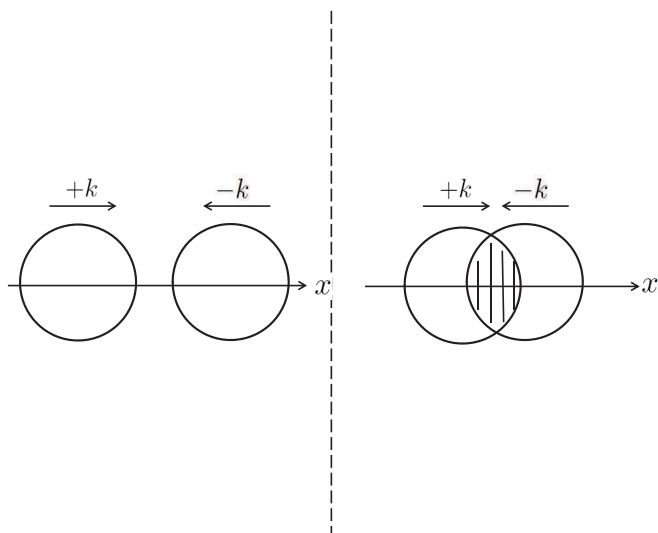


FIGURE 1 – La partie gauche de la figure représente deux groupes de particules préparés de façon indépendante : le premier comprend un grand nombre N_1 de particules se trouvant dans le même état individuel d'impulsion $+k$ le long de l'axe Ox se dirigeant vers la droite, l'autre N_2 particules se trouvant dans un autre état individuel d'impulsion opposée $-k$ se dirigeant vers la gauche. Chacun de ces groupes de particules indépendantes constitue un "condensat". La partie droite montre que, au bout d'un certain temps, les deux condensats se recouvrent dans l'espace, ce qui permet de mesurer les positions des particules dans la région de recouvrement. Pour simplifier, les calculs sont effectués à une dimension, en ne tenant compte que de la coordonnée le long de l'axe Ox .

La mesure de la première position est totalement aléatoire mais, au fur et à mesure que les mesures s'accroissent, on constate un regroupement périodique des positions observées formant progressivement un système de franges de plus en plus net. Ces franges traduisent l'apparition d'une phase relative entre les deux condensats, qui ne peut provenir que de l'effet des mesures de position puisqu'elle était totalement absente lors du début de l'expérience.

Si l'on répète le processus depuis le début, on observe une position des franges qui est en général différente de celle de la première expérience : la phase qui apparaît dans chaque réalisation de l'expérience est totalement indépendante des précédentes.

de la position $x = x_2$, etc. Les calculs que nous présentons ici sont valables quel que soit l'état $|\Phi_0\rangle$ du système de particules identiques. Ils sont en fait équivalents à ceux de l'étude générale des fonctions de corrélation au § B-3 du Chapitre XVI; nous les présentons cependant ici à nouveau dans le contexte spécifique du présent complément. Au § 2, nous appliquerons les résultats obtenus au cas particulier où $|\Phi_0\rangle$ est un double état de Fock.

1-a. Mesure simple (une seule particule)

À une mesure de position donnant un résultat compris dans l'intervalle $D_1 = [x_1 - \frac{\Delta}{2}, x_1 + \frac{\Delta}{2}]$, nous pouvons associer l'opérateur hermitique :

$$P_{\Delta}(x_1) = \int_{x_1 - \frac{\Delta}{2}}^{x_1 + \frac{\Delta}{2}} dx \Psi^{\dagger}(x) \Psi(x) \quad (4)$$

où $\Psi(x)$ est l'opérateur champ détruisant une particule au point x , et $\Psi^{\dagger}(x)$ son hermitique conjugué créant une particule. La valeur moyenne de $P_{\Delta}(x_1)$ donne le nombre moyen de particules dans l'intervalle D_1 . Dans la suite, nous supposons souvent que Δ est suffisamment petit par rapport aux autres dimensions du problème pour permettre l'approximation :

$$P_{\Delta}(x_1) \simeq \Delta \times \Psi^{\dagger}(x_1) \Psi(x_1) \quad (5)$$

L'opérateur $P_{\Delta}(x_1)$ est un opérateur symétrique à une particule du type de celui de la relation (B-1) du Chapitre XV. Il s'écrit donc également sous la forme :

$$P_{\Delta}(x_1) = \sum_{q=1}^N \int_{x_1 - \frac{\Delta}{2}}^{x_1 + \frac{\Delta}{2}} dx |q : x\rangle \langle q : x| \quad (6)$$

qui est la somme sur toutes les particules $q = 1, 2, \dots, N$ des projecteurs dans l'intervalle D_1 de la position de chacune d'entre elles. Comme ces projecteurs commutent tous entre eux et que chacun d'entre eux a pour valeur propre 1 et 0, les valeurs propres de $P_{\Delta}(x_1)$ sont donc égales à 0, 1, 2, ... N . Cependant, si Δ est suffisamment petit, on ne peut trouver qu'une seule particule à la fois dans l'intervalle D_1 ; seules les valeurs propres 0 et 1 sont alors accessibles, de sorte que $P_{\Delta}(x_1)$ peut être assimilé au projecteur associé à la mesure de la présence d'une particule dans l'intervalle D_1 :

$$[P_{\Delta}(x_1)]^2 = P_{\Delta}(x_1) \quad \text{si } \Delta \rightarrow 0 \quad (7)$$

Supposons alors que le système soit dans l'état $|\Phi_0\rangle$. La probabilité \mathcal{P}_{D_1} de trouver une particule dans l'intervalle infinitésimal D_1 de longueur Δ est :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{D_1}(x_1) &= \langle \Phi_0 | P_{\Delta}(x_1) | \Phi_0 \rangle \\ &= \Delta \langle \Phi_0 | \Psi^{\dagger}(x_1) \Psi(x_1) | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (8)$$

Immédiatement après la détection de cette première particule, le système est, d'après la relation (E.39) du Chapitre III (postulat de réduction du paquet d'ondes), dans l'état normé :

$$|\Phi'_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{P}_{D_1}(x_1)}} P_{\Delta}(x_1) |\Phi_0\rangle \quad (9)$$

1-b. Mesure double (deux particules)

Intéressons-nous maintenant à la probabilité $\mathcal{P}_{D_1 D_2}(x_2, x_1)$ de détecter une première particule dans un intervalle de largeur Δ autour du point x_1 , puis une seconde particule dans un intervalle Δ autour du point x_2 ; nous supposons que le système n'a pas le temps d'évoluer entre les deux mesures.

Commençons par évaluer la probabilité conditionnelle² $\mathcal{P}_{D_1 D_2}(x_2/x_1)$ de détecter une particule dans l'intervalle $[x_2 - \frac{\Delta}{2}, x_2 + \frac{\Delta}{2}]$ noté D_2 , sachant qu'on a détecté une particule dans l'intervalle $[x_1 - \frac{\Delta}{2}, x_1 + \frac{\Delta}{2}]$ noté D_1 . Cette probabilité est égale à :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{D_1 D_2}(x_2/x_1) &= \langle \Phi'_0 | P_\Delta(x_2) | \Phi'_0 \rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{P}_{D_1}(x_1)} \langle \Phi_0 | P_\Delta(x_1) P_\Delta(x_2) P_\Delta(x_1) | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (10)$$

Dans la seconde ligne, nous avons fait usage de (9); le projecteur $P_\Delta(x_2)$ est obtenu en remplaçant x_1 par x_2 dans l'expression (4). Nous supposons que les deux intervalles de détection sont disjoints dans l'espace, de sorte que tous les opérateurs contenus dans $P_\Delta(x_1)$ commutent avec ceux contenus dans $P_\Delta(x_2)$. Nous avons alors, compte tenu de (7) :

$$\begin{aligned} P_\Delta(x_1) P_\Delta(x_2) P_\Delta(x_1) &= [P_\Delta(x_1)]^2 P_\Delta(x_2) \\ &= P_\Delta(x_1) P_\Delta(x_2) \end{aligned} \quad (11)$$

Si Δ est suffisamment petit, nous pouvons remplacer $P_\Delta(x_1)$ et $P_\Delta(x_2)$ par leurs expressions (5), ce qui fait apparaître l'opérateur :

$$\begin{aligned} P_\Delta(x_1) P_\Delta(x_2) &= \Delta^2 \Psi^\dagger(x_1) \Psi(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \Psi(x_2) \\ &= \Delta^2 \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \Psi(x_2) \Psi(x_1) \end{aligned} \quad (12)$$

où, dans la seconde ligne, nous avons à nouveau utilisé la commutation des opérateurs champ définis dans des régions disjointes de l'espace. Reportons ce résultat dans (10); il vient :

$$\mathcal{P}_{D_1 D_2}(x_2/x_1) = \frac{\Delta^2}{\mathcal{P}_{D_1}(x_1)} \langle \Phi_0 | \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \Psi(x_2) \Psi(x_1) | \Phi_0 \rangle \quad (13)$$

Mais la probabilité de détecter une particule au point x_1 , puis une particule au point x_2 , est égale au produit de la probabilité $\mathcal{P}_{D_1}(x_1)$ de détecter une particule au point x_1 par la probabilité conditionnelle $\mathcal{P}_{D_1 D_2}(x_2/x_1)$ de détecter une particule au point x_2 sachant qu'on a détecté une particule au point x_1 :

$$\mathcal{P}_{D_1 D_2}(x_2, x_1) = \mathcal{P}_{D_1}(x_1) \times \mathcal{P}_{D_1 D_2}(x_2/x_1) \quad (14)$$

On déduit alors immédiatement de (13) que :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{D_1 D_2}(x_2, x_1) &= \Delta^2 \langle \Phi_0 | \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \Psi(x_2) \Psi(x_1) | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_{21} | \Phi_{21} \rangle \end{aligned} \quad (15)$$

2. On remarquera la distinction de notation entre la probabilité conditionnelle $\mathcal{P}_{D_1 D_2}(x_2/x_1)$, avec une barre de fraction entre les variables, et la probabilité simple (probabilité a priori) $\mathcal{P}_{D_1 D_2}(x_2, x_1)$ de l'obtention des deux résultats. Ces deux probabilités sont reliées par la relation (14).

où $|\Phi_{21}\rangle$ est l'état non normé :

$$|\Phi_{21}\rangle = \Delta \times \Psi(x_2) \Psi(x_1) |\Phi_0\rangle \quad (16)$$

La probabilité recherchée est donc simplement donnée par le carré de la norme du ket obtenu à partir de l'état initial en détruisant une particule au point x_1 , puis une seconde particule au point x_2 , multiplié par l'intervalle infinitésimal de mesure Δ .

1-c. Généralisation : nombre quelconque de mesures de positions

Les calculs précédents concernent les mesures de densité simple et de densité double ; nous les généralisons maintenant aux mesures de densités d'ordres plus élevés. A partir de maintenant, pour simplifier la notation, nous omettons l'indice D des probabilités \mathcal{P} .

Pour calculer la probabilité associée à une mesure triple, on part de l'expression du vecteur d'état du système juste après la détection de la deuxième particule en x_2 . De façon similaire à (9), et compte tenu de (10), cet état normé s'écrit :

$$|\Phi_0''\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \Phi_0' | P_\Delta(x_2) | \Phi_0' \rangle}} P_\Delta(x_2) |\Phi_0'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{P}(x_2/x_1)}} P_\Delta(x_2) |\Phi_0'\rangle \quad (17)$$

soit, si l'on reporte (9) et fait usage de (14) :

$$\begin{aligned} |\Phi_0''\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{P}(x_2/x_1)\mathcal{P}(x_1)}} P_\Delta(x_2) P_\Delta(x_1) |\Phi_0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{P}(x_2, x_1)}} P_\Delta(x_2) P_\Delta(x_1) |\Phi_0\rangle \end{aligned} \quad (18)$$

La probabilité de la troisième mesure en x_3 , sachant que les deux premières mesures ont donné des résultats en x_1 et x_2 , est donc :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(x_3/x_2, x_1) &= \langle \Phi_0'' | P_\Delta(x_3) | \Phi_0'' \rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{P}(x_2, x_1)} \langle \Phi_0 | P_\Delta(x_2) P_\Delta(x_1) P_\Delta(x_3) P_\Delta(x_2) P_\Delta(x_1) | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (19)$$

Comme plus haut, nous considérons que les zones de mesures de position sont disjointes, de sorte que tous les opérateurs de projection commutent :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(x_3/x_2, x_1) &= \frac{1}{\mathcal{P}(x_2, x_1)} \langle \Phi_0 | P_\Delta(x_3) P_\Delta(x_2) P_\Delta(x_1) | \Phi_0 \rangle \\ &= \frac{\Delta^3}{\mathcal{P}(x_2, x_1)} \langle \Phi_0 | \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \Psi^\dagger(x_3) \Psi(x_3) \Psi(x_2) \Psi(x_1) | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (20)$$

Dans la seconde ligne, nous avons considéré que Δ est suffisamment petit pour que nous puissions utiliser la relation approchée (5).

Mais, comme la loi des probabilités conditionnelles indique que la probabilité des trois mesures en x_1 , x_2 et x_3 est donnée par :

$$\mathcal{P}(x_3, x_2, x_1) = \mathcal{P}(x_2, x_1) \times \mathcal{P}(x_3/x_2, x_1) \quad (21)$$

on aboutit simplement à :

$$\mathcal{P}(x_3, x_2, x_1) = \Delta^3 \langle \Phi_0 | \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \Psi^\dagger(x_3) \Psi(x_3) \Psi(x_2) \Psi(x_1) | \Phi_0 \rangle \quad (22)$$

qui généralise directement (15).

Le même type de raisonnement permet de montrer que la probabilité associée à la mesure de Q positions est proportionnelle à la valeur moyenne dans l'état du système d'un produit de $2Q$ opérateurs champ Ψ^\dagger et Ψ rangés dans l'ordre normal et évalués en x_1, x_2, \dots, x_Q . Les probabilités sont donc égales aux fonctions de corrélation spatio-temporelles des opérateurs champ rangés dans l'ordre normal (et multipliées par Δ^Q).

2. Augmentation de l'intrication sous l'effet du processus de détection

Jusqu'ici, nous avons raisonné de façon générale, sans spécifier l'état initial $|\Phi_0\rangle$ du système étudié. Nous allons maintenant supposer qu'il s'agit d'un double condensat, comme en (3), et pour simplifier l'écriture nous prendrons $N_1 = N_2 = N$ (en fait, la suite du calcul ne nécessite que l'hypothèse $N_1 \simeq N_2$). Ainsi N particules occupent l'état individuel $|k\rangle$ d'impulsion bien définie $\hbar k$, et un nombre égal de particules occupent l'état $|-k\rangle$ d'impulsion opposée :

$$|\Phi_0\rangle = |N : +k; N : -k\rangle = \frac{1}{N!} \left[a_{+k}^\dagger \right]^N \left[a_{-k}^\dagger \right]^N |0\rangle \quad (23)$$

Nous nous proposons d'étudier les signaux d'interférence qui peuvent apparaître dans les taux de comptage simple et double mesurés sur un tel état. Nous utilisons pour cela les probabilités calculées plus haut ainsi que les expressions (A-3) et (A-6) du Chapitre XVI des opérateurs champ :

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \frac{1}{L^{1/2}} \left[e^{ikx} a_k + e^{-ikx} a_{-k} + \dots \right] \\ \Psi^\dagger(x) &= \frac{1}{L^{1/2}} \left[e^{-ikx} a_k^\dagger + e^{ikx} a_{-k}^\dagger + \dots \right] \end{aligned} \quad (24)$$

où a_k (ou a_{-k}) et a_k^\dagger (ou a_{-k}^\dagger) sont les opérateurs d'annihilation et de création d'une particule dans les modes k (ou $-k$), et où L est le côté de la boîte dans laquelle sont normalisées les ondes planes ; les pointillés symbolisent les autres termes du développement des opérateurs champ sur ces opérateurs qui, comme nous le verrons, ne jouent aucun rôle dans la suite des calculs à cause de l'état initial (23) choisi.

2-a. Mesures de densité simple $\mathcal{P}(x_1)$

La relation (8) devient :

$$\mathcal{P}(x_1) = \Delta \langle N : +k; N : -k | \Psi^\dagger(x_1) \Psi(x_1) | N : +k; N : -k \rangle \quad (25)$$

En utilisant les expressions (24) des opérateurs champ et le fait que les termes croisés $a_{-k}^\dagger a_k$ et $a_k^\dagger a_{-k}$ ont une valeur moyenne nulle dans le double état de Fock (23), on obtient :

$$\mathcal{P}(x_1) = \frac{\Delta}{L} \langle N : +k; N : -k | a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k} | N : +k; N : -k \rangle = \frac{2N\Delta}{L} \quad (26)$$

Il ne se produit donc pas d'interférence dans les signaux de mesure de densité simple. Ceci n'est pas étonnant puisque, dans le double état de Fock initial, aucune phase n'est définie qui permettrait de déterminer la position éventuelle de telles franges.

2-b. Intrication entre les deux modes après la première détection

La relation (9) fournit le ket $|\Phi'_0\rangle$ juste après la première mesure, qui s'écrit ici :

$$\begin{aligned} |\Phi'_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{P}(x_1)}} \int_{x_1 - \frac{\Delta}{2}}^{x_1 + \frac{\Delta}{2}} dx \Psi^\dagger(x) \Psi(x) |\Phi_0\rangle \\ &= \frac{1}{L\sqrt{\mathcal{P}(x_1)}} \int_{x_1 - \frac{\Delta}{2}}^{x_1 + \frac{\Delta}{2}} dx \left[e^{-ikx} a_k^\dagger + e^{ikx} a_{-k}^\dagger + \dots \right] \\ &\quad \times \left[e^{ikx} a_k + e^{-ikx} a_{-k} + \dots \right] |\Phi_0\rangle \end{aligned} \quad (27)$$

Compte tenu de (3) et (5), on a donc si Δ est infinitésimal :

$$\begin{aligned} |\Phi'_0\rangle \propto \left\{ 2N |\Phi_0\rangle + \sqrt{N(N+1)} \left[e^{-2ikx_1} |N+1 : k; N-1 : -k\rangle \right. \right. \\ \left. \left. + e^{2ikx_1} |N-1 : k; N+1 : -k\rangle \right] + \dots \right\} \end{aligned} \quad (28)$$

où le $+\dots$ désigne des composantes de $|\Phi'_0\rangle$ où une particule occupe un état individuel autre que k ou $-k$; ces composantes ne jouent aucun rôle dans la suite. On voit sur (28) que l'intrication de l'état $|\Phi'_0\rangle$ a augmenté sous l'effet de la détection de la première particule. Cet état contient en effet une superposition linéaire de l'état initial et de deux états supplémentaires du système global, $|N-1 : +k; N : -k\rangle$ et $|N : +k; N-1 : -k\rangle$; les coefficients de cette superposition, et en particulier leur phase relative, dépendent du point x_1 où a été détectée la première particule.

2-c. Mesures de densité double $\mathcal{P}(x_2, x_1)$

Calculons maintenant la probabilité $\mathcal{P}(x_2, x_1)$ associée à une mesure de densité double. Les relations (15) et (16) montrent que cette probabilité est le carré de la norme du ket :

$$|\Phi_{21}\rangle = \Delta \times \Psi(x_2) \Psi(x_1) |N : +k; N : -k\rangle \quad (29)$$

Si nous reportons dans cette égalité la première relation (24), les termes symbolisés par \dots disparaissent (puisque seuls sont initialement peuplés deux états individuels $+k$ et $-k$, de sorte que les opérateurs de destruction en question donnent zéro). Nous obtenons alors :

$$|\Phi_{21}\rangle = \frac{\Delta}{L} \times \left[e^{ikx_2} a_k + e^{-ikx_2} a_{-k} \right] \left[e^{ikx_1} a_k + e^{-ikx_1} a_{-k} \right] |N : +k; N : -k\rangle \quad (30)$$

soit :

$$\begin{aligned} |\Phi_{21}\rangle &= \frac{\Delta}{L} \times \left\{ \sqrt{N(N-1)} \left[e^{ik(x_1+x_2)} |N-2 : +k; N : -k\rangle \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + e^{-ik(x_1+x_2)} |N : +k; N-2 : -k\rangle \right] \right. \\ &\quad \left. + N \left[e^{ik(x_2-x_1)} + e^{ik(x_1-x_2)} \right] |N-1 : +k; N-1 : -k\rangle \right\} \end{aligned} \quad (31)$$

Le carré de la norme de ce vecteur d'état donne la probabilité :

$$\mathcal{P}(x_2, x_1) = \frac{\Delta^2}{L^2} \{2N(N-1) + 4N^2 \cos^2 [k(x_2 - x_1)]\} \quad (32)$$

La présence du cosinus de $k(x_2 - x_1)$ indique la présence d'une dépendance spatiale, contrairement à ce qui se produisait pour $\mathcal{P}(x_1)$: une fois qu'une première mesure de position est observée en x_1 , les positions x_2 les plus probables pour la seconde observation sont celles pour lesquelles $k(x_2 - x_1)$ est un multiple de π ; il apparaît donc des franges dans la mesure de la densité double.

2-d. Discussion physique

On peut se demander quels sont les objets qui interfèrent dans le signal de comptage double. Ce ne sont pas des ondes mais des amplitudes de transition associées à deux chemins différents qui conduisent le système de l'état initial (23) à un même état final $|N-1, +k; N-1, -k\rangle$, où chacun des deux modes a perdu une particule. Dans le calcul précédent, le premier chemin correspond au terme en $(e^{-ikx_2} a_{-k}) (e^{ikx_1} a_k)$, où une particule d'impulsion $+k$ a disparu en étant détectée en x_1 et la particule $-k$ a disparu en étant détectée en x_2 ; le second chemin correspond au terme en $(e^{ikx_2} a_k) (e^{-ikx_1} a_{-k})$ où c'est la particule d'impulsion $-k$ qui disparaît en étant détectée en x_1 alors que la particule $+k$ disparaît en étant détectée en x_2 .

Le signal de comptage double observable sur un double condensat rappelle beaucoup celui calculé au § 2-c- γ du Complément E_{XX} , qui concerne le signal de photo-détection double obtenu sur un produit de deux paquets d'ondes à un photon. Dans les deux cas, la dépendance spatiale qui apparaît dans le signal à la suite des deux détections provient d'une interférence quantique entre les amplitudes de deux chemins distincts ; ces deux chemins conduisent le système d'un même état initial vers un même état final, et sont obtenus par un "aiguillage" différent entre l'une des deux composantes de l'état initial et l'une des deux composantes de l'état final.

3. Détection d'un grand nombre de particules Q

Nous étendons maintenant le raisonnement précédent au cas où un nombre quelconque Q de mesures de positions de particules sont effectuées ; nous supposons toutefois que Q reste très inférieur au nombre total de particules N de chaque condensat.

3-a. Probabilité d'une séquence de détections multiples

La généralisation de la relation (22) permet d'écrire la probabilité $\mathcal{P}(x_Q, \dots, x_2, x_1)$ de détecter une particule en x_1 , une particule en x_2 , .. une particule en x_Q , sous la forme :

$$\mathcal{P}(x_Q, \dots, x_2, x_1) = \Delta^Q \langle N : +k; N : -k | \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \dots \Psi^\dagger(x_Q) \Psi(x_Q) \dots \Psi(x_2) \Psi(x_1) | N : +k; N : -k \rangle \quad (33)$$

Comme plus haut, nous utilisons les relations (24) pour remplacer les opérateurs champ et leurs adjoints par des combinaison linéaires des opérateurs d'annihilation

a_k , a_{-k} et de création a_k^\dagger , a_{-k}^\dagger . Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(x_Q, \dots, x_2, x_1) = \frac{\Delta^Q}{L^Q} \langle N : +k; N : -k | (a_k^\dagger e^{-ikx_1} + a_{-k}^\dagger e^{ikx_1}) \dots \\ \dots (a_k^\dagger e^{-ikx_Q} + a_{-k}^\dagger e^{ikx_Q}) (a_k e^{ikx_Q} + a_{-k} e^{-ikx_Q}) \dots \\ \dots (a_k e^{ikx_1} + a_{-k} e^{-ikx_1}) | N : +k; N : -k \rangle \end{aligned} \quad (34)$$

α . *Hypothèse simplificatrice*

Quand plusieurs opérateurs d'annihilation agissent successivement à droite sur le ket initial, chacun d'entre eux introduit un facteur variable $\sqrt{N-p}$; ce facteur dépend du nombre p de particules déjà annihilées par les autres opérateurs. De même, quand ils agissent à gauche sur le bra initial, les opérateurs de création introduisent des facteurs qui varient. Cependant, afin de simplifier les calculs, nous négligerons ces variations en supposant que le nombre total Q de détection reste toujours très petit devant le nombre total N de particules dans chaque état individuel :

$$Q \ll N \quad (35)$$

On peut alors remplacer tous les facteurs $\sqrt{N-p}$ par \sqrt{N} :

$$\sqrt{N-p} \simeq \sqrt{N} \quad (36)$$

A part une multiplication par un facteur fixe \sqrt{N} , le seul effet de chaque opérateur est alors de varier un nombre d'occupation d'une unité; il ne dépend pas des opérations précédentes subies par le vecteur d'état (les opérations commutent une fois cette approximation faite). On peut alors déplacer librement les opérateurs d'annihilation et de création dans le produit d'opérateurs apparaissant dans (34). Si nous regroupons les opérateurs associés aux mêmes valeurs de x_i , il apparaît l'opérateur :

$$\begin{aligned} D(x_j) &= (a_k^\dagger e^{-ikx_j} + a_{-k}^\dagger e^{ikx_j}) (a_k e^{ikx_j} + a_{-k} e^{-ikx_j}) \\ &= \left[a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k} + a_k^\dagger a_{-k} e^{-2ikx_j} + a_{-k}^\dagger a_k e^{2ikx_j} \right] \end{aligned} \quad (37)$$

et l'expression (34) devient :

$$\mathcal{P}(x_Q, \dots, x_2, x_1) = \frac{\Delta^Q}{L^Q} \langle N : +k; N : -k | \prod_{j=1}^Q D(x_j) | N : +k; N : -k \rangle \quad (38)$$

Il ne nous reste donc plus qu'à calculer la valeur moyenne dans l'état initial d'un produit d'opérateurs $D(x_j)$. Lorsque nous développons chacun d'entre eux selon la seconde ligne de (37), il apparaît la somme de 4^Q produits, dont beaucoup ont cependant une valeur moyenne nulle dans le double état de Fock $|\Phi_0\rangle$. En effet, les seuls produits de valeurs moyennes non nulles sont ceux pour lesquels l'effet répété des opérateurs d'annihilation a_k est exactement compensé par celui d'un nombre égal d'opérateurs a_k^\dagger (le nombre de particules dans l'état individuel $-k$ est alors également constant, puisque le nombre total de particules est conservé).

Considérons alors l'un des produits non nuls. Dans le cadre de l'approximation (36), chaque opérateur $D(x_j)$ y contribue par l'un des trois facteurs $NF_{q_j}(x_j)$, avec $q_j = 0, \pm 1$ et :

$$\begin{aligned} F_0(x_j) &= 2 \\ F_{\pm 1}(x_j) &= e^{\pm 2ikx_j} \end{aligned} \quad (39)$$

où F_0 correspond à la contribution qui ne change pas les nombres de particules, F_{+1} à celle qui remplace une particule $+k$ par une particule $-k$, et enfin F_{-1} à celle qui effectue la substitution inverse. La somme de tous ces produits vaut donc :

$$P(x_Q, \dots, x_2, x_1) = \frac{\Delta^Q}{L^Q} \sum_{\{q_j\}} \prod_{j=1}^Q NF_{q_j}(x_j) \quad (40)$$

où l'accolade $\{q_j\}$ indique que la somme sur les q_j est prise sur toutes les valeurs possibles de q_1, q_2, \dots , soumises à la contrainte que leur somme S soit nulle :

$$S = \sum_{j=1}^Q q_j = 0 \quad (41)$$

Cette contrainte exprime simplement la conservation du nombre de particules dans chaque état individuel.

β . *Expression simple de la probabilité*

Une façon commode d'imposer la contrainte (41) sur les q_j est d'introduire un delta de Kronecker $\delta_{S,0}$ en écrivant :

$$P(x_Q, \dots, x_2, x_1) = \frac{\Delta^Q}{L^Q} \sum_{q_1, q_2, \dots, q_N} \delta_{S,0} \prod_{j=1}^Q NF_{q_j}(x_j) \quad (42)$$

où les sommes sur les q_j sont maintenant indépendantes. Nous pouvons ensuite insérer la relation :

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\xi}{2\pi} e^{iS\xi} = \delta_{S,0} \quad (43)$$

qui revient à multiplier chaque terme $F_{q_j}(x_j)$ de (40) par $\exp(iq_j\xi)$ et à sommer sur $d\xi$. Il vient en conséquence :

$$P(x_Q, \dots, x_2, x_1) = \frac{\Delta^Q}{L^Q} \int_0^{2\pi} \frac{d\xi}{2\pi} \prod_{j=1}^Q \sum_{q_j} N e^{iq_j\xi} F_{q_j}(x_j) \quad (44)$$

Chaque somme sur q_j introduit alors la quantité :

$$\begin{aligned} N [F_0(x_j) + F_+(x_j)e^{i\xi} + F_-(x_j)e^{-i\xi}] \\ = N [2 + \exp(2ikx_j + i\xi) + \exp(-2ikx_j - i\xi)] \end{aligned} \quad (45)$$

soit :

$$2N [1 + \cos(2kx_j + \xi)] \quad (46)$$

Pour finir, nous obtenons l'expression analytique simple suivante du taux de détection multiple :

$$P(x_Q, \dots, x_2, x_1) = \left(\frac{2\Delta N}{L} \right)^Q \int_0^{2\pi} \frac{d\xi}{2\pi} \prod_{j=1}^Q [1 + \cos(2kx_j + \xi)] \quad (47)$$

3-b. Discussion physique ; émergence d'une phase relative

La relation (47) permet de comprendre comment une phase relative émerge progressivement sous l'effet des mesures successives.

α. Les premières détections

Considérons tout d'abord la toute première détection en $x = x_1$. L'équation (47) donne la probabilité d'une telle détection :

$$P(x_1) \propto \int_0^{2\pi} \frac{d\xi}{2\pi} \cos^2(kx_1 + \frac{\xi}{2}) \quad (48)$$

Dans l'intégrale, le terme en cosinus donne les franges qui seraient attendues par interférence entre deux ondes de nombres d'onde $+k$ et $-k$ le long de l'axe x et déphasées de ξ . Mais la somme sur $d\xi$ indique qu'il faut intégrer la figure d'interférence sur toutes les valeurs possibles de ξ équiparties entre 0 et 2π , ce qui revient à dire que les franges disparaissent complètement par brouillage.

Le taux de détection double en x_1 et x_2 s'obtient en gardant les termes $j = 1$ et $j = 2$ dans (47). Il est donc égal à :

$$P(x_2, x_1) \propto \int_0^{2\pi} \frac{d\xi}{2\pi} \cos^2(kx_2 + \frac{\xi}{2}) \cos^2(kx_1 + \frac{\xi}{2}) \quad (49)$$

Dans cette équation, x_1 est fixé puisque la première détection a eu lieu et le produit des deux cosinus donne la probabilité de trouver la deuxième particule en x_2 . L'intégration sur $d\xi$ qui donne la dépendance en x_2 de la probabilité ne s'effectue plus maintenant sur une phase ξ équipartie entre 0 et 2π , à cause de la présence du $\cos^2(kx_1 + \xi/2)$ associé à la première détection ; le brouillage des franges ne se produit donc plus comme précédemment. Pour la deuxième détection, la fonction $\cos^2(kx_1 + \xi/2)$ joue en fait le rôle d'une distribution de phase dépendant de x_1 ; les deux détections ne sont pas indépendantes. La discussion qualitative du § 2 est ainsi confirmée.

Le mécanisme se généralise à des mesures d'ordres plus élevés. Ainsi le taux de détection triple en x_1 , x_2 et x_3 est égal à :

$$P(x_3, x_2, x_1) \propto \int_0^{2\pi} \frac{d\xi}{2\pi} \cos^2(kx_3 + \frac{\xi}{2}) \cos^2(kx_2 + \frac{\xi}{2}) \cos^2(kx_1 + \frac{\xi}{2}) \quad (50)$$

Une fois que les deux premières détections ont été effectuées en x_1 et x_2 , la distribution de phase relative qui intervient pour la troisième détection est un produit

de deux fonctions cosinus $\cos^2(2kx_2 + \xi/2) \cos^2(2kx_1 + \xi/2)$ – et non plus une seule fonction cosinus comme c'était le cas précédemment. Comme le produit de deux fonctions cosinus donne une courbe plus fine qu'une seule fonction, la phase relative est mieux définie pour la troisième détection que pour la seconde. Le processus continue de la même façon pour les détectons suivantes, qui précisent de mieux en mieux la phase. Il en découle que ce sont les premières détectons qui déterminent la position des franges apparaissant dans les détectons suivantes, chacune d'entre elles contribuant à une définition de plus en plus précise de la distribution de phase relative.

Le raisonnement précédent n'est bien sûr valable que pour une seule réalisation de l'expérience : si l'on recommence l'expérience dans les mêmes conditions, les premières détectons ne vont en général pas se produire aux mêmes endroits que lors de la première expérience. En conséquence, après un grand nombre de détectons, on obtient un système de frange décalé par rapport au premier. Enfin, si l'on superpose les positions obtenues dans un grand nombre d'expériences successives, les franges se moyennent presque à zéro, de sorte que l'on obtient une répartition des positions quasi uniforme.

β. Emergence d'une phase relative bien définie après un grand nombre de détectons

Après un grand nombre Q de détectons, la distribution de phase relative pour la $(Q + 1)^{\text{ème}}$ détection est donnée par un produit d'un grand nombre Q de fonctions cosinus, donnant lieu à une distribution de phase très étroite centrée en une valeur ξ_M . On peut alors, dans (47), remplacer tous les $[1 + \cos(2kx_j + \xi)]$ par $[1 + \cos(2kx_j + \xi_M)]$, de sorte que la probabilité devient un produit : les détectons sont alors indépendantes, la figure d'interférence se stabilise, et son contraste devient de plus en plus net. Ces prédictions sont confirmées par des simulations numériques effectuées à partir de l'équation (47).

Etude de l'affinement de la distribution de phase relative

Un calcul analytique permet d'étudier l'affinement de la distribution de phase relative. Supposons qu'après Q détectons cette distribution soit approximativement une gaussienne de largeur σ_Q centrée en ξ_M :

$$W_Q(\xi) \simeq e^{-(\xi - \xi_M)^2 / \sigma_Q^2} \tag{51}$$

Après la $(Q + 1)^{\text{ème}}$ détection, la nouvelle distribution sera donnée par :

$$W_{Q+1}(\xi) \simeq e^{-(\xi - \xi_M)^2 / \sigma_Q^2} [1 + \cos(2kx_{Q+1} + \xi)]. \tag{52}$$

Comme la fonction $1 + \cos(2kx_{Q+1} + \xi)$ est beaucoup plus large que $W_{Q+1}(\xi)$, on peut la développer en puissances de $\xi - \xi_M$ au voisinage de $\xi = \xi_M$ où la distribution $W_Q(\xi)$ prend des valeurs importantes, ce qui donne :

$$\begin{aligned} 1 + \cos(2kx_{Q+1} + \xi) &= 1 + \cos(2kx_{Q+1} + \xi_M) \\ &\quad - (\xi - \xi_M) \sin(2kx_{Q+1} + \xi_M) \\ &\quad - \frac{1}{2} (\xi - \xi_M)^2 \cos(2kx_{Q+1} + \xi_M) \end{aligned} \tag{53}$$

On peut aussi développer $W_Q(\xi)$ au voisinage de $\xi = \xi_M$

$$e^{-(\xi - \xi_M)^2 / \sigma_Q^2} = 1 - \frac{(\xi - \xi_M)^2}{\sigma_Q^2} \tag{54}$$

et multiplier (53) par (54). On obtient ainsi le développement de $W_{Q+1}(\xi)$:

$$\begin{aligned} W_{Q+1}(\xi) &\simeq 1 + \cos(2kx_{Q+1} + \xi_M) - (\xi - \xi_M) \sin(2kx_{Q+1} + \xi_M) \\ &+ (\xi - \xi_M)^2 \left[-\frac{1}{2} \cos(2kx_{Q+1} + \xi_M) + \frac{1}{\sigma_Q^2} (1 + \cos(2kx_{Q+1} + \xi_M)) \right] \end{aligned} \tag{55}$$

En fait, $W_{Q+1}(\xi)$ dépend de la position x_{Q+1} de la $(Q + 1)^{\text{ème}}$ détection. On obtient une valeur moyenne de $W_{Q+1}(\xi)$ en pondérant $W_{Q+1}(\xi)$ par la probabilité $[1 + \cos(2kx_{Q+1} + \xi_M)]$ pour que la $(Q + 1)^{\text{ème}}$ détection se produise en $x = x_{Q+1}$ et en intégrant sur x_{Q+1} sur une période spatiale de la figure d'interférence :

$$\overline{W_{Q+1}(\xi)} = \int_0^{2\pi/2k} dx_{Q+1} [1 + \cos(2kx_{Q+1} + \xi_M)] W_{Q+1}(\xi). \tag{56}$$

Comme :

$$\begin{aligned} \overline{\cos(2kx_{Q+1} + \xi_M)} &= \overline{\sin(2kx_{Q+1} + \xi_M)} \\ &= \overline{\cos(2kx_{Q+1} + \xi_M) \sin(2kx_{Q+1} + \xi_M)} = 0 \end{aligned} \tag{57}$$

et :

$$\overline{\cos^2(2kx_{Q+1} + \xi_M)} = \frac{1}{2} \tag{58}$$

on obtient finalement :

$$\overline{W_{Q+1}(\xi)} \simeq \frac{3}{2} [1 - (\xi - \xi_M)^2] \left[\frac{1}{\sigma_Q^2} + \frac{1}{6} \right] \simeq e^{-(\xi - \xi_M)^2 / \sigma_{Q+1}^2} \tag{59}$$

où :

$$\frac{1}{\sigma_{Q+1}^2} = \frac{1}{\sigma_Q^2} + \frac{1}{6}. \tag{60}$$

L'équation (60) montre que $\sigma_{Q+1} < \sigma_Q$. La courbe s'affine donc après chaque nouvelle détection. On peut facilement itérer l'équation (60) et obtenir :

$$\frac{1}{\sigma_{Q+n}^2} = \frac{1}{\sigma_Q^2} + \frac{n}{6} \tag{61}$$

où n est un entier positif. On voit ainsi que, si $n \gg 1/\sigma_Q^2$, la largeur de la distribution de phase relative décroît en $1/\sqrt{n}$.

Une étude analogue peut être faite pour étudier le déplacement de l'abscisse du maximum de $W_{Q+1}(\xi)$ quand Q croît. On trouve que le déplacement du centre de la distribution de phase relative varie en $1/n$.

Il est intéressant enfin de noter le lien qui existe entre l'incertitude sur la phase relative (qui décroît quand le nombre Q de détections augmente) et l'incertitude sur la différence $N_+ - N_-$ entre les nombres N_{\pm} de particules dans les condensats $\pm k$ (qui, au contraire, croît). Au début de l'expérience (avant la première détection),

on a $N_+ = N_- = N$. Après la première détection, nous avons vu au § 2 que l'état du système est une superposition linéaire des états $N_+ = N \pm 1$ et $N_- = N \mp 1$: la différence $N_+ - N_-$ entre N_+ et N_- n'est plus fixée à zéro, mais peut prendre plusieurs valeurs $0, \pm 2$. Après la deuxième détection, l'état du système est une superposition d'états ayant toujours la même valeur de $N_+ + N_-$, mais des valeurs de $N_+ - N_-$ qui peuvent être égales à $0, \pm 2, \dots$ et ainsi de suite. Après Q détections, les valeurs de $N_+ - N_-$ s'étagent entre $-2Q$ et $+2Q$. Ce résultat illustre que phase relative et différence entre les nombres de particules dans les deux condensats sont des grandeurs conjuguées.

Conclusion

Ce complément illustre comment des mesures successives, du fait qu'elles sont sensibles à la phase relative entre les composantes d'un système de N particules sur deux états individuels, peuvent faire apparaître une phase qui était totalement absente de l'état initial du système. Mathématiquement, la relation (47) montre que les résultats obtenus pour un ensemble de Q mesures de positions (avec $Q \ll N$) sont exactement les mêmes que si une phase initiale ξ bien définie avait existé depuis le début de l'expérience, tout en étant totalement inconnue (et donc répartie uniformément entre 0 et 2π). Les mesures ont certes introduit de l'intrication et la phase associée, mais les prédictions quantiques restent équivalentes à celles qu'on obtiendrait en supposant qu'elles ne font que révéler une phase pré-existante (comme dans les théories quantiques dites "à variables supplémentaires").

Mais le processus que nous avons étudié reste de nature essentiellement différente : c'est bien chaque mesure individuelle qui contribue à une définition de plus en plus précise de la phase relative pour les mesures suivantes ; elles se produisent en un point x dont la distribution de probabilité dépend des résultats de toutes les mesures antérieures. Nous verrons au Complément D_{XXI} que si, au lieu de mesurer une proportion de l'ensemble des particules, on les soumet toutes à une mesure, les propriétés de la phase ne peuvent plus être comprises comme celles d'une phase classique pré-existante (mais inconnue) ; elles deviennent clairement quantiques, comme l'atteste la possibilité de violations des inégalités de Bell.

Complément D_{XXI}

Emergence d'une phase relative sur des condensats à spin, argument EPR et non-localité macroscopiques

1	Deux condensats à spin	690
1-a	Rappels : spin 1/2	690
1-b	Projecteurs associés aux mesures	691
2	Probabilités des différents résultats de mesure	692
2-a	Une première expression de la probabilité	692
2-b	Introduction de la phase et de l'angle quantique	694
3	Discussion	696
3-a	Nombre de mesures $Q \ll 2N$	696
3-b	Argument EPR macroscopique	698
3-c	Mesures de l'ensemble des spins et violations des inégalités de Bell	700

Ce complément reprend la discussion du Complément C_{XXI} concernant l'apparition d'une phase relative entre condensats sous l'effet des processus de mesure, mais dans un cas plus général. Nous avons vu que, au fur et à mesure que les résultats des mesures s'accumulent, tout en restant dans le cas où le nombre de mesures reste petit devant le nombre total de particules, la phase relative des deux condensats est de mieux en mieux définie; elle atteint rapidement un régime classique où elle est (presque) parfaitement déterminée. Ceci implique d'ailleurs nécessairement de grandes fluctuations des nombres de particules occupant les deux états individuels (plus précisément de leur différence), comme l'impose la relation d'incertitude entre phase et nombres d'occupation.

Dans le présent complément, une première différence importante est que nous ne supposons plus que le nombre de mesures reste petit par rapport au nombre total de particules. Nous pourrions ainsi suivre l'évolution des propriétés de la phase pendant toute la série de mesures, y compris jusqu'au moment où le nombre de particules qui restent à mesurer tombe à quelques unités. Pour ces quelques particules restantes, les fluctuations de la différence des nombres d'occupation sont alors elles aussi limitées à ces quelques unités, de sorte qu'il n'est plus possible de définir la phase avec précision. La phase revient alors à un régime quantique, où il est impossible d'interpréter les résultats des mesures dans un cadre classique (phase existant initialement mais totalement inconnue). Une seconde différence est que nous allons supposer que les deux condensats correspondent à des états individuels de spins différents. Les mesures peuvent alors porter sur la direction des spins et fournir des résultats discrets, au lieu des résultats continus obtenus dans des mesures de positions; ceci rend la discussion des effets quantiques plus aisée. Nous verrons que ces effets peuvent conduire à des violations des inégalités de Bell (Chapitre XXI, § F-3). Un autre intérêt de considérer des spins est qu'ils permettent de reprendre l'argument EPR (Chapitre XXI, § F-1) dans un cas où les éléments de réalité pris en

compte par EPR sont macroscopiques et, de plus, ont une interprétation physique simple (moment cinétique des spins).

1. Deux condensats à spin

Nous supposons maintenant que les deux états individuels peuplés dans les condensats sont deux états $|u, \pm\rangle$ correspondant à deux états internes différents, notés $|\pm\rangle$, mais au même état orbital $|u\rangle$:

$$|u, \pm\rangle = |u\rangle \otimes |\pm\rangle \quad (1)$$

Si $(a_{u,+})^\dagger$ et $(a_{u,-})^\dagger$ sont les opérateurs de création associés à ces états, l'état $|\Phi_0\rangle$ du système des deux condensats juxtaposés s'écrit alors :

$$|\Phi_0\rangle = \frac{1}{N!} \left[(a_{u,+})^\dagger \right]^N \left[(a_{u,-})^\dagger \right]^N |0\rangle \quad (2)$$

qui remplace la relation (23) du Complément C_{XXI} ; le nombre total de particules est $2N$.

Par commodité, nous appellerons souvent "états de spin" les deux états $|\pm\rangle$, et raisonnerons comme si c'étaient les deux états accessibles à des spins 1/2. Bien sûr, ce n'est là qu'une facilité de langage : selon le théorème spin-statistique (Chapitre XIV, § C.1), les bosons ne peuvent être des particules de spin demi-entier. Le système que nous considérons est en fait un ensemble de bosons n'ayant accès qu'à deux états internes, qui peuvent par exemple être les deux états $m = 0$ et $m = 1$ d'un spin 1, ou ne sont pas nécessairement des états de spin.

1-a. Rappels : spin 1/2

Pour ce qui va suivre, il est commode de commencer par rappeler (Chapitre IV, § A.2) quelques relations concernant un spin 1/2 (sans variables orbitales). Comme mentionné plus haut, il s'agit d'un spin fictif, dont les opérateurs agissent sur deux états internes quelconques, notés $|\pm\rangle$ par pure commodité. L'opérateur σ_z associé à la première matrice de Pauli (Complément A_{IV}) est égal à la différence entre le projecteur sur l'état $|+\rangle$ et l'état $|-\rangle$:

$$\sigma_z = |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| \quad (3)$$

alors que les opérateurs σ_x et σ_y s'expriment en fonction des deux opérateurs non diagonaux $|+\rangle\langle-|$ et $|-\rangle\langle+|$ selon :

$$\begin{aligned} \sigma_x &= |+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+| \\ \sigma_y &= -i|+\rangle\langle-| + i|-\rangle\langle+| \end{aligned} \quad (4)$$

Pour la composante du spin fictif le long d'une direction $O\varphi$ du plan xOy faisant un angle φ avec l'axe Ox , l'opérateur correspondant s'écrit :

$$\sigma_\varphi = \cos \varphi \sigma_x + \sin \varphi \sigma_y = e^{-i\varphi} |+\rangle\langle-| + e^{i\varphi} |-\rangle\langle+| \quad (5)$$

Il a pour valeurs propres $\eta = \pm 1$, et ses vecteurs propres sont :

$$\begin{aligned} |\psi_{\eta=+1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{-i\phi/2} |+\rangle + e^{i\phi/2} |-\rangle \right] \\ |\psi_{\eta=-1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-e^{-i\phi/2} |+\rangle + e^{i\phi/2} |-\rangle \right] \end{aligned} \quad (6)$$

comme on le vérifie facilement en appliquant l'opérateur (5) à ces expressions. Le projecteur sur le ket de valeur propre η s'écrit donc :

$$\begin{aligned} P_\eta(\varphi) &= \frac{1}{2} [1 + \eta \sigma_\varphi] \\ &= \frac{1}{2} [1 + \eta (e^{-i\varphi} |+\rangle \langle -| + e^{i\varphi} |-\rangle \langle +|)] \end{aligned} \quad (7)$$

1-b. Projecteurs associés aux mesures

Pour un ensemble de bosons identiques munis de variables orbitales, nous notons $\Psi_\pm(\mathbf{r})$ les deux opérateurs champ associés aux deux états internes \pm . L'opérateur associé à la densité totale de particules au point \mathbf{r} est la somme des densités locales, $\Psi_+^\dagger(\mathbf{r})\Psi_+(\mathbf{r})$ correspondant à l'état de spin $+$, et $\Psi_-^\dagger(\mathbf{r})\Psi_-(\mathbf{r})$ correspondant à l'état $-$:

$$n(\mathbf{r}) = \Psi_+^\dagger(\mathbf{r})\Psi_+(\mathbf{r}) + \Psi_-^\dagger(\mathbf{r})\Psi_-(\mathbf{r}) \quad (8)$$

Pour l'opérateur associé à la composante σ_z du spin le long de l'axe de quantification Oz , la relation (3) indique qu'il est la différence :

$$\sigma_z(\mathbf{r}) = \Psi_+^\dagger(\mathbf{r})\Psi_+(\mathbf{r}) - \Psi_-^\dagger(\mathbf{r})\Psi_-(\mathbf{r}) \quad (9)$$

Selon (5), une mesure effectuée le long d'une direction $O\varphi$ du plan xOy faisant un angle φ avec l'axe Ox est associée à l'opérateur :

$$\sigma_\varphi(\mathbf{r}) = e^{-i\varphi} \Psi_+^\dagger(\mathbf{r})\Psi_-(\mathbf{r}) + e^{i\varphi} \Psi_-^\dagger(\mathbf{r})\Psi_+(\mathbf{r}) \quad (10)$$

Les mesures que nous allons prendre en compte sont des mesures portant à la fois sur la position des particules et leur spin : pour chaque mesure, la position est trouvée dans un volume infinitésimal Δ centré autour du point \mathbf{r}_j et, lors d'une mesure de la direction du spin le long de la direction $O\varphi_j$, le résultat $\eta_j = \pm 1$ est obtenu. Par analogie avec (7), le projecteur associé à une telle mesure s'écrit alors :

$$\begin{aligned} P_{\eta_j}(\mathbf{r}_j, \varphi_j) &= \frac{1}{2} \int_{\Delta} d^3r' [n(\mathbf{r}') + \eta_j \sigma_{\varphi_j}(\mathbf{r}')] \\ &\simeq \frac{\Delta}{2} [n(\mathbf{r}_j) + \eta_j \sigma_{\varphi_j}(\mathbf{r}_j)] \end{aligned} \quad (11)$$

où $n(\mathbf{r})$ et $\sigma_\varphi(\mathbf{r})$ ont les expressions (8) et (10). L'opérateur $P_{\eta_j}(\mathbf{r}_j, \varphi_j)$ projette à la fois les variables orbitales dans ce petit domaine et les spins sur l'état propre de la composante le long de l'axe $O\varphi_j$ de valeur propre $\eta_j = \pm 1$.

2. Probabilités des différents résultats de mesure

Considérons maintenant un système de $2N$ bosons dans l'état (2). Les mesures sont réalisées dans une série de régions disjointes de l'espace (Figure 1), chacune centrée en \mathbf{r}_j (avec $j = 1, 2, \dots, 2N$) ; on y effectue une mesure de la composante du spin selon une direction transverse (perpendiculaire à l'axe de quantification) repérée par l'angle φ_j , et la mesure fournit le résultat $\eta_j = \pm 1$. Les régions de mesure peuvent être conjointes et couvrir l'ensemble du support de la fonction d'onde, de sorte qu'à chaque réalisation de l'expérience les $2N$ particules sont effectivement détectées (les mesures sont supposées idéales) ; si ces régions sont suffisamment petites, les détectations se produisent dans $2N$ régions différentes. Nous allons maintenant calculer la probabilité d'obtenir une série de résultats $\eta_j = \pm 1$ dans $2N$ régions données.

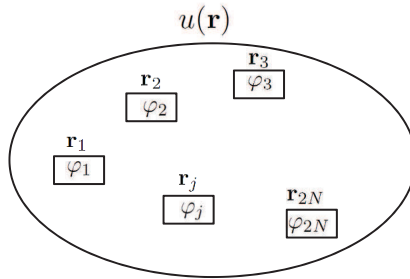


FIGURE 1 – Deux condensats de N particules chacun, l'un de spin $+$ et l'autre de spin $-$, partagent la même fonction d'onde orbitale $u(\mathbf{r})$, représentée par l'ovale sur la figure. Des mesures de la direction transverse des spins sont effectuées dans $2N$ régions de l'espace centrées aux points \mathbf{r}_j (avec $j = 1, 2, \dots, 2N$) ; ces régions sont sans recouvrement mutuel (mais elles peuvent être conjointes et recouvrir tout le support de la fonction d'onde orbitale). Dans chaque région, la mesure est effectuée le long d'une direction transverse (perpendiculaire à l'axe de quantification) repérée par un angle φ_j , qui peut dépendre de j ; le résultat correspondant est $\eta_j = \pm 1$.

2-a. Une première expression de la probabilité

Les projecteurs associés $P_{\eta_j}(\mathbf{r}_j, \varphi_j)$ commutent tous entre eux, puisqu'ils contiennent des opérateurs champ (et leurs adjoints) en des points de l'espace différents. La probabilité $\mathcal{P}(\eta_1, \dots, \eta_{2N})$ d'un résultat est donc la valeur moyenne dans l'état $|\Phi_0\rangle$ du

produit des projecteurs :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}_{2N}(\{\eta_i, \varphi_i\}) &= \langle \Phi_0 | \prod_{j=1}^{2N} P_{\eta_j}(\mathbf{r}_j, \varphi_j) | \Phi_0 \rangle \\
 &= \left(\frac{\Delta}{2}\right)^{2N} \langle \Phi_0 | \prod_{j=1}^{2N} \left\{ \Psi_+^\dagger(\mathbf{r}_j) \Psi_+(\mathbf{r}_j) + \Psi_-^\dagger(\mathbf{r}_j) \Psi_-(\mathbf{r}_j) \right. \\
 &\quad \left. + \eta_j e^{-i\varphi_j} \Psi_+^\dagger(\mathbf{r}_j) \Psi_-(\mathbf{r}_j) + \eta_j e^{i\varphi_j} \Psi_-^\dagger(\mathbf{r}_j) \Psi_+(\mathbf{r}_j) \right\} | \Phi_0 \rangle \quad (12)
 \end{aligned}$$

où $\{\eta_i, \varphi_i\}$ symbolise l'ensemble des variables $(\eta_1, \varphi_1, \dots, \eta_N, \varphi_N)$. La commutation des opérateurs permet également de pousser tous les opérateurs champ $\Psi_\pm(\mathbf{r}_j)$ vers la droite, leurs adjoints $\Psi_\pm^\dagger(\mathbf{r}_j)$ vers la gauche. Introduisons maintenant une base de fonctions d'onde $u_i(\mathbf{r})$ dont la première est la fonction d'onde des états peuplés (1). Cette base permet de développer les opérateurs champ selon la relation (A-14) du Chapitre XVI, de sorte que :

$$\Psi_\pm(\mathbf{r}_j) = \sum_i u_i(\mathbf{r}_j) a_{u_i, \pm} \quad (13)$$

où $a_{u_i, \pm}$ est l'opérateur d'annihilation d'une particule dans l'état individuel $|u_i, \pm\rangle$. Mais le seul terme qui intervienne en fait dans ce développement est le terme $i = 1$: tous les autres termes $i \neq 1$ donnent zéro lorsqu'ils agissent sur l'état $|\Phi_0\rangle$, qui ne contient que des particules dans un état orbital $u_1(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r})$; on peut donc simplement remplacer $\Psi_\pm(\mathbf{r}_j)$ par $u(\mathbf{r}_j) a_{u, \pm}$. Il en est de même des opérateurs adjoints des champs qui, agissant sur le bra qui les précède, ne peuvent détruire des particules que dans l'état peuplé ; on peut donc également remplacer $\Psi_\pm^\dagger(\mathbf{r}_j)$ par $u^*(\mathbf{r}_j) a_{u, \pm}^\dagger$. Une fois ces substitutions effectuées, il vient une expression que nous écrivons symboliquement :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}_{2N}(\{\eta_i, \varphi_i\}) &= \\
 &= \left(\frac{\Delta}{2}\right)^{2N} \langle \Phi_0 | \prod_{j=1}^{2N} |u(\mathbf{r}_j)|^2 \left[a_{u, +}^\dagger a_{u, +} + a_{u, -}^\dagger a_{u, -} + \right. \\
 &\quad \left. + \eta_j e^{-i\varphi_j} a_{u, +}^\dagger a_{u, -} + \eta_j e^{i\varphi_j} a_{u, -}^\dagger a_{u, +} \right] | \Phi_0 \rangle \quad (14)
 \end{aligned}$$

La raison pour laquelle cette écriture est symbolique est que, du fait de l'ordonnement des opérateurs $\Psi_\pm(\mathbf{r}_j)$ et $\Psi_\pm^\dagger(\mathbf{r}_j)$ mentionné plus haut, dans tous les 4^{2N} termes du produit sur j il faut considérer que tous les opérateurs d'annihilation $a_{u, \pm}$ ont été repoussés vers la droite, tous les opérateurs de création $a_{u, \pm}^\dagger$ vers la gauche. Le calcul de la probabilité recherchée se ramène donc à celui de valeurs moyennes dans l'état $|\Phi_0\rangle$ de 4^{2N} produits dans l'ordre normal (Complément B_{XVI}, § 1-a- α) d'opérateurs de création et d'annihilation dans deux états $|u_{i=1}, \pm\rangle$.

La situation rappelle alors de près la discussion de la relation (37) du Complément C_{XXI}. Le calcul que nous allons effectuer est effectivement semblable, à ceci près que nous ne faisons plus l'approximation (35) de ce complément (nombre de mesures petit devant le nombre de particules) : nous supposons ici que toutes les particules sont mesurées. En fait, la plupart des termes du produit sur j qui figure dans

(14) sont nuls en valeur moyenne dans l'état $|\Phi_0\rangle$. En premier lieu, seuls contribuent réellement ceux qui contiennent exactement N opérateurs d'annihilation $a_{u,+}$ et N autres opérateurs d'annihilation $a_{u,-}$, cas auquel leur effet conduit au vide, donc à un ket normé ; sinon, le résultat est nul. En second lieu, et pour une raison semblable, ils doivent contenir exactement N opérateurs de création $a_{u,+}^\dagger$ et N autres $a_{u,-}^\dagger$, sinon le résultat est nul. Pour les termes non nuls, toutes les valeurs moyennes sont les mêmes, puisque le produit d'opérateurs dans l'ordre normal introduit à chaque fois le même facteur $(\sqrt{N!} \times \sqrt{N!})^2$, soit $(N!)^2$; il apparaît également le produit de $2N$ coefficients F_{q_j, q'_j} prenant l'une des 4 valeurs :

$$F_{+1,+1} = F_{-1,-1} = 1 \tag{15}$$

et :

$$F_{+1,-1} = \eta e^{-i\varphi} \quad F_{-1,+1} = \eta e^{i\varphi} \tag{16}$$

Or $F_{+1,+1}$ correspond à un terme associé à une destruction d'une particule dans l'état $|u, +\rangle$, suivie d'une création d'une particule dans le même état. De même, $F_{-1,-1}$ correspond à une annihilation-création dans l'état individuel $|u, -\rangle$. Enfin, $F_{+1,-1}$ correspond à une annihilation dans l'état $|u, -\rangle$ suivie d'une création dans l'état $|u, +\rangle$, et l'inverse pour $F_{-1,+1}$. Tous les termes non nuls correspondent donc à des produits de $2N$ nombres F_{q_j, q'_j} tels que la somme des q_i et celle des q'_j soit nulle ; cette condition assure automatiquement la conservation du nombre des particules dans chacun des états individuels. Pour finir, nous obtenons :

$$\mathcal{P}_{2N}(\{\eta_i, \varphi_i\}) = \left(\frac{\Delta}{2}\right)^{2N} (N!)^2 \prod_{j=1}^{2N} |u(\mathbf{r}_j)|^2 \sum_{\{q_j, q'_j\}} F_{q_j, q'_j} \tag{17}$$

où l'accolade autour des indices de sommation sur $q_j = \pm 1$ et $q'_j = \pm 1$ a pour rôle de rappeler que seuls doivent être pris en compte les termes obéissant à la double contrainte :

$$\begin{aligned} \sum_j q_j &= S = 0 \\ \sum_j q'_j &= S' = 0 \end{aligned} \tag{18}$$

2-b. Introduction de la phase et de l'angle quantique

Du fait des contraintes des sommations, l'expression (17) n'est guère maniable. Pour tenir compte de ces contraintes de façon commode, nous introduisons deux fonctions $\delta_{S,0}$ et $\delta_{S',0}$ sous la forme :

$$\begin{aligned} \delta_{S,0} &= \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\xi}{2\pi} e^{iS\xi} \\ \delta_{S',0} &= \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\xi'}{2\pi} e^{iS'\xi'} \end{aligned} \tag{19}$$

Ceci revient à multiplier dans (17) chaque F_{q_j, q'_j} par $e^{i(q_j \xi + q'_j \xi')}$ et à intégrer sur $d\xi$ et $d\xi'$. Il vient alors :

$$\mathcal{P}_{2N}(\{\eta_i, \varphi_i\}) = \left(\frac{\Delta}{2}\right)^{2N} (N!)^2 \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\xi}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\xi'}{2\pi} \prod_{j=1}^{2N} |u(\mathbf{r}_j)|^2 \sum_{q_j, q'_j} e^{i(q_j \xi + q'_j \xi')} F_{q_j, q'_j} \quad (20)$$

où, cette fois, les sommes sur les q_j et q'_j sont indépendantes grâce aux relations (19), qui incorporent automatiquement les contraintes. Pour chaque valeur de j , chaque somme contribue alors par le facteur :

$$F_{+1,+1} e^{i(\xi+\xi')} + F_{-1,-1} e^{-i(\xi+\xi')} + F_{+1,-1} e^{i(\xi-\xi')} + F_{-1,+1} e^{i(\xi'-\xi)} = 2 \cos(\xi + \xi') + 2\eta_j \cos(\xi - \xi' - \varphi_j) \quad (21)$$

Effectuons enfin le changement de variables¹ :

$$\begin{aligned} \Lambda &= \xi + \xi' \\ \lambda &= \xi - \xi' \end{aligned} \quad (22)$$

Nous obtenons alors l'expression plus simple :

$$\mathcal{P}_{2N}(\{\eta_i, \varphi_i\}) = (\Delta)^{2N} (N!)^2 \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\Lambda}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} \prod_{j=1}^{2N} |u(\mathbf{r}_j)|^2 [\cos \Lambda + \eta_j \cos(\lambda - \varphi_j)] \quad (23)$$

C'est sur ce résultat que se fonde toute la discussion qui va suivre. Pour des raisons qui apparaîtront ci-dessous, λ est appelé phase, tandis que Λ est appelé "angle quantique".

Remarque :

Une remarque utile pour la suite est que le second membre de cette égalité ne change pas de valeur si l'on effectue la substitution :

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\Lambda}{2\pi} \Rightarrow 2 \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} \frac{d\Lambda}{2\pi} \quad (24)$$

Pour le montrer, on peut décomposer l'intégrale sur $d\Lambda$ en une somme $I = I_1 + I_2$, où I_1 est la somme prise entre $-\pi/2$ et $+\pi/2$, et I_2 est la somme prise entre $\pi/2$ et $3\pi/2$ (la fonction à intégrer étant de période 2π , tout domaine d'intégration recouvrant le cercle de la même façon est équivalent). Mais I_2 est simplement égale à I_1 . En effet, la fonction à intégrer est multipliée par $(-1)^{2N} = 1$ lorsqu'on change Λ en $\Lambda' = \Lambda - \pi$ ainsi que λ en $\lambda' = \lambda - \pi$. Un changement de variables d'intégration Λ, λ en Λ', λ' permet alors de donner à I_2 le même domaine d'intégration que I_1 .

1. Le jacobien de ce changement de variables introduit au dénominateur un facteur 2; mais ce facteur est compensé par la réduction du domaine d'intégration des deux variables λ et Λ entre $-\pi$ et $+\pi$, qui introduit un autre facteur 2.

3. Discussion

Nous examinons en premier lieu le cas où le nombre de mesures est négligeable devant le nombre de particules dans chaque condensat ; ceci nous permettra de comparer les résultats obtenus avec ceux du Complément C_{XXI}.

3-a. Nombre de mesures $Q \ll 2N$

Commençons par rappeler une propriété générale de la mécanique quantique concernant les observables compatibles (Chapitre III, § C.6.a). Lorsque plusieurs opérateurs A, B, C , etc. commutent, on peut construire une base de vecteurs propres communs. Le produit scalaire de ces vecteurs propres par le vecteur d'état du système fournit l'amplitude de probabilité de trouver le système dans chacun de ces vecteurs propres. Si les valeurs propres sont non dégénérées, le module au carré de cette amplitude donne la probabilité de trouver les valeurs propres correspondantes, lors d'une série de mesures simultanées associées à l'ensemble des opérateurs A, B, C , etc. Si elles sont dégénérées, il suffit de sommer les probabilités sur tous les kets propres orthogonaux. C'est ce que nous avons fait jusqu'ici dans ce complément.

Supposons maintenant que l'on ignore les résultats de mesures associés à l'un ou plusieurs opérateurs de la série, par exemple B et C ; les probabilités des résultats des mesures qui restent prises en compte sont alors simplement les sommes sur les résultats possibles associés aux mesures ignorées (somme des probabilités d'événements exclusifs). Mais on peut également envisager une autre situation où les grandeurs associées à B et C ne sont jamais mesurées. Les valeurs propres des opérateurs mesurés A, D , etc. sont alors moins nombreuses que dans le cas précédent, ce qui augmente en général leur degré de dégénérescence. Quant aux valeurs propres des opérateurs B et C , même si elles ne correspondent plus à aucune mesure, elles peuvent toujours être utilisées comme des indices servant à distinguer entre eux les divers vecteurs propres orthogonaux associés aux résultats de mesure des opérateurs A, D , etc. Il faut donc, comme plus haut, sommer les probabilités sur ces valeurs propres, ce qui conduit à effectuer exactement la même opération que pour des mesures ignorées. La conclusion est que la mécanique quantique fournit les mêmes probabilités si l'on suppose, soit que les résultats de mesures de B et C sont ignorés, soit que les mesures en question ne sont jamais effectuées.

Calculons donc la probabilité \mathcal{P}_Q d'obtenir les résultats η_1, \dots, η_Q lors de Q mesures effectuées sur les spins. Comme nous disposons déjà de la probabilité (23) correspondant au cas $Q = 2N$, il est commode de considérer que toutes ces mesures ont été effectuées, mais que nous ne tenons pas compte des résultats obtenus lors de $2N - Q$ mesures. Comme nous venons de le voir, cela revient à additionner dans (23) les probabilités des deux résultats possibles pour chacune de ces $2N - Q$ mesures ignorées, c'est-à-dire les probabilités associées à deux valeurs opposées des η_j . Dans le produit sur j de (23), le $\cos(\lambda - \varphi_j)$ disparaît alors pour tous les termes concernés, ne laissant que le $\cos \Lambda$. On obtient alors l'expression suivante de \mathcal{P}_Q (nous omettons à partir de maintenant les facteurs numériques, qui ne sont pas utiles pour la suite

de la discussion) :

$$\mathcal{P}_Q(\{\eta_i, \varphi_i\}) \propto \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} \frac{d\Lambda}{2\pi} [\cos \Lambda]^{2N-Q} \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} \prod_{j=1}^Q |u(\mathbf{r}_j)|^2 [\cos \Lambda + \eta_j \cos(\lambda - \varphi_j)] \quad (25)$$

Dans cette expression, la notation $(\{\eta_i, \varphi_i\})$ symbolise maintenant Q couples de variables (η, φ) , au lieu de $2N$ comme précédemment. L'intégrale sur $d\Lambda$ contient la fonction $\cos \Lambda$ élevée à la puissance $2N - Q$; si $Q \ll 2N$, cette puissance est élevée, ce qui introduit un pic étroit autour de la valeur nulle et permet d'écrire :

$$\mathcal{P}_Q(\{\eta_i, \varphi_i\}) \propto \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} \prod_{j=1}^Q |u(\mathbf{r}_j)|^2 [1 + \eta_j \cos(\lambda - \varphi_j)] \quad (26)$$

Nous obtenons alors un résultat qui rappelle fortement celui obtenu dans la relation (47) du Complément C_{XXI}, à savoir un produit de probabilités individuelles positives² :

$$p_j(\lambda, \varphi_j) = \frac{1}{2} |u(\mathbf{r}_j)|^2 [1 + \eta_j \cos(\lambda - \varphi_j)] \quad (27)$$

Ce produit est ensuite moyenné sur un angle λ pouvant prendre n'importe quelle valeur entre $-\pi$ et $+\pi$. La probabilité (27) n'est autre que celle de trouver le résultat η_j lors de la mesure de la composante le long de l'axe de direction φ_j d'un spin unique, si l'on suppose qu'il est initialement polarisé dans une direction repérée par l'angle λ .

Vérification :

Appelons en effet Oz l'axe de quantification des spins, et considérons un spin polarisé dans la direction (transverse) du plan xOy faisant un angle λ avec l'axe Ox . La relation (A-22-a) du Chapitre IV indique que son état est alors :

$$|\psi_\lambda\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-i\lambda/2} |+\rangle + e^{+i\lambda/2} |-\rangle] \quad (28)$$

Si l'on mesure la composante du spin le long de l'axe repéré par l'angle φ , l'état associé au résultat de mesure $\eta = +1$ est :

$$|\psi_\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-i\varphi/2} |+\rangle + e^{+i\varphi/2} |-\rangle] \quad (29)$$

La probabilité de ce résultat est donc :

$$\mathcal{P}_{\eta=+1} = |\langle \psi_\varphi | \psi_\lambda \rangle|^2 = \frac{1}{4} [e^{i(\lambda-\varphi)/2} + e^{-i(\lambda-\varphi)/2}]^2 = \cos^2 \frac{\lambda - \varphi}{2} \quad (30)$$

$$= \frac{1}{2} [1 + \cos(\lambda - \varphi)] \quad (31)$$

Pour la probabilité du résultat $\eta = -1$, c'est simplement la probabilité complémentaire, obtenue en changeant le signe devant le $\cos(\lambda - \varphi)$. Dans les deux cas, nous retrouvons donc bien la probabilité (27).

2. Le $1/2$ normalise la somme des deux probabilités ($\eta_j = \pm 1$) à la probabilité de présence de la particule dans le volume de détection.

On peut ainsi assimiler λ à une phase relative des deux condensats. Dans ce cas, les prédictions de la mécanique quantique sont donc identiques à celles d'une théorie où la phase serait considérée comme une grandeur classique ; cette variable serait parfaitement déterminée dès le début de l'expérience, mais inconnue. Dans un tel schéma, les mesures successives révéleraient alors cette phase pré-existante de façon de plus en plus précise, au lieu de la créer comme c'est le cas dans le cadre de l'interprétation standard de la mécanique quantique. On voit ainsi poindre un lien avec l'enjeu de l'argument EPR.

3-b. Argument EPR macroscopique

Nous avons présenté au § F-1 du Chapitre XXI l'argument EPR. Il se base sur une double hypothèse de réalisme et de localité, et y ajoute celle que toutes les prévisions de la mécanique quantique sont exactes. La conclusion du raisonnement est que la mécanique quantique est nécessairement incomplète : pour la rendre complète, il faudrait lui ajouter des "éléments de réalité". Dans le cadre d'une expérience EPRB mettant en jeu deux spins dans un état singulet, ces éléments de réalité peuvent prendre la forme de directions des spins bien définies avant même qu'aucune mesure ne soit effectuée.

Un tel ajout fait évidemment sortir du cadre de la mécanique quantique standard. Bohr y était opposé ; il mettait en avant que la notion d'éléments de réalité proposée par EPR ne peut s'appliquer à des systèmes microscopiques, car les isoler par l'esprit du dispositif expérimental qui les entoure n'a pas de sens. Comme nous l'avons discuté dans le Chapitre XXI, cette position est solide sur le plan logique ; elle permet effectivement d'invalider les conclusions du raisonnement EPR. Mais nous allons voir que les doubles condensats fournissent un autre cas d'application du raisonnement EPR, dans un cas particulièrement intéressant, car il met en jeu des grandeurs physiques macroscopiques (ainsi d'ailleurs que la conservation du moment cinétique). Ces grandeurs peuvent en principe être à notre échelle, de sorte qu'il devient plus difficile de refuser de leur attribuer une réalité physique indépendante.

Considérons donc un système physique dans un état quantique semblable à (2), où les deux états internes $|\pm\rangle$ des particules sont des états propres de la composante sur un axe de quantification Oz du spin, par exemple les états $m = 0$ et $m = 1$ d'un spin $S = 1$. Pour la clarté de la discussion, nous supposons cependant que les fonctions d'onde orbitales des deux condensats sont distinctes, mais se recouvrent dans deux régions de l'espace, comme schématisé sur la Figure 2. Ces deux régions sont séparées par une distance arbitrairement grande. Deux opérateurs, Alice et Bob, y réalisent des mesures de la composante des spins dans des directions transverses³, N_A mesures pour Alice, N_B pour Bob. Pour chaque mesure, chacun d'entre eux choisit à son gré une direction repérée par l'angle φ_i ; les choix d'Alice sont faits de façon indépendante de ceux de Bob, et inversement. Une première série de mesures ($1 \leq i \leq N_A$) est réalisée par Alice dans une première région de l'espace et, aussitôt après, Bob en réalise une seconde série ($N_A + 1 \leq i \leq N_A + N_B$) dans un autre laboratoire, situé très loin.

Or nous avons vu que, lorsqu'Alice a mesuré les spins de quelques particules, l'effet instantané de cette opération est de fixer la phase relative des deux condensats

3. La direction longitudinale est celle de la polarisation des spins dans l'état initial (2), les directions transverses sont les directions qui lui sont perpendiculaires.

dans tout l'espace avec une bonne précision (d'autant meilleure que le nombre de mesures est grand). Ceci fixe également la direction transversale des spins. Alice ne peut toutefois pas décider quelle sera cette direction, qui est fixée de façon totalement aléatoire lors des mesures. La mécanique quantique standard prédit alors que, lorsque Bob effectue ses propres mesures, il est pratiquement certain qu'il va trouver la même phase relative (à une petite erreur négligeable près). Comme il peut effectuer un très grand nombre de mesures, il peut ainsi avoir connaissance de la direction des spins créée, puis observée par Alice, et ceci de façon quasi instantanée. L'argument EPR consiste alors à souligner que, comme aucune interaction n'a pu se propager entre le laboratoire d'Alice et celui de Bob, il n'est pas possible que cette orientation transversale ait été créée par les mesures d'Alice : elle pré-existait nécessairement à toute mesure.

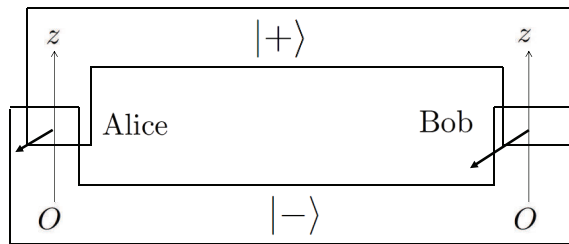


FIGURE 2 – Schéma d'une expérience portant sur un double condensat de spins, l'un dans l'état interne $+$, l'autre dans l'état $-$. Les deux condensats ont des fonctions d'onde orbitales différentes, mais qui se recouvrent dans deux régions de l'espace où deux opérateurs, Alice et Bob, effectuent des mesures. Ces deux régions sont arbitrairement éloignées. Alice et Bob mesurent des spins un par un, en choisissant à chaque fois une composante transverse (perpendiculaire à l'axe de quantification Oz) repérée par un angle φ . Alors qu'initialement les deux condensats n'ont aucune phase relative, les premières mesures effectuées par Alice en font émerger une. Le fait que cette phase se propage instantanément jusqu'à la région éloignée de l'espace où opère Bob crée un paradoxe. Ce dernier rappelle l'argument EPR, mais dans un cas plus frappant parce que les "éléments de réalité" EPR peuvent être macroscopiques.

La nouveauté de la situation par rapport à celle concernant deux spins est que les observations de Bob peuvent porter sur un nombre arbitrairement grand de spins ; en fait, sa mesure revient alors à celle de la direction du moment cinétique d'un système de spins qui est macroscopique, possédant un moment cinétique arbitrairement grand. Comme il s'agit maintenant de grandeurs physiques macroscopiques, on ne peut alors plus arguer que le monde microscopique n'est directement accessible ni à l'expérience humaine, ni à sa description par le langage humain comme le soulignait Bohr. Dans ce cas, il semble donc plus artificiel de refuser de prendre en compte séparément les propriétés physiques des systèmes occupant des régions précises de l'espace, comme le suggère Bohr. L'argument EPR prend ainsi une force plus grande.

La référence [79] contient une discussion de cette situation inattendue en termes de conservation du moment angulaire.

3-c. Mesures de l'ensemble des spins et violations des inégalités de Bell

Supposons maintenant que l'on mesure tous les spins ; l'effet de sélection autour de la valeur $\Lambda = 0$ ne se produit plus. L'interprétation en termes de probabilités d'événements individuels n'est alors plus possible : dans (23), le facteur $[\cos \Lambda + \eta_j \cos (\lambda - \varphi_j)]$ prend parfois des valeurs négatives, ce qui interdit évidemment de le considérer comme une probabilité standard. Il est d'ailleurs fréquent en mécanique quantique que des effets purement quantiques apparaissent par l'intermédiaire de termes de "probabilités négatives", comme c'est le cas ici. On appelle Λ "angle quantique", ce qui souligne que son rôle est d'introduire de tels effets, en particulier des effets de non-localité et des violations des inégalités de Bell.

Montrer que de telles violations se produisent pour une valeur quelconque de N demande d'utiliser la relation (23), où apparaissent de nombreux paramètres (tous les angles de mesure, qui sont arbitraires) ; dans ce cas, il s'avère plus commode de recourir à un calcul numérique, comme cela est fait dans la seconde des références [79]. Cependant, notre but est ici simplement de démontrer que la phase ne se comporte pas toujours de façon classique. C'est pourquoi, sans présenter ce calcul numérique, nous nous contenterons d'étudier le comportement de l'expression (23) dans le cas le plus simple de deux mesures sur deux spins ($Q = 2$ et $N = 1$). Ceci nous permettra de vérifier que cette expression prédit bien l'existence de violations, au moins dans certains cas (même si, pour deux spins les calculs pourraient être menés directement et de façon plus élémentaire), renvoyant à la référence ci-dessus pour une généralisation.

En effet, si l'on utilise la définition (A-7) du Chapitre XV des états de Fock, on peut mettre l'état (2) sous la forme :

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= (a_{u,+})^\dagger (a_{u,-})^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1 : u, +; 2 : u, -\rangle + |1 : u, -; 2 : u, +\rangle] \\ &= |1 : u; 2 : u\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} [|1 : +; 2 : -\rangle + |1 : -; 2 : +\rangle] \end{aligned} \quad (32)$$

Il apparaît dans cette expression un état de spin intriqué, qui est très semblable à celui que nous avons considéré au § B du Chapitre XXI ; la seule différence est un signe + dans l'état de spin, au lieu du signe - de l'état singulet considéré dans ce chapitre, mais cette différence est sans grande conséquence (nous verrons plus bas précisément ce qu'il en est - cf. note 4). On s'attend donc effectivement à ce qu'un tel état conduise à des effets quantiques marqués, par exemple la possibilité de violations des inégalités de Bell.

Vérifions donc que la relation générale (23) permet effectivement de retrouver des violations des inégalités de Bell dans un cas simple. Pour $N = 2$, elle devient en

effet :

$$\begin{aligned} & \mathcal{P}_2(\eta_1, \varphi_1; \eta_2, \varphi_2) \\ & \propto \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\Lambda}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} [\cos \Lambda + \eta_1 \cos(\lambda - \varphi_1)] [\cos \Lambda + \eta_2 \cos(\lambda - \varphi_2)] \\ & = \frac{1}{2} [1 + \eta_1 \eta_2 \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 + \eta_1 \eta_2 \sin \varphi_1 \sin \varphi_2] \end{aligned} \quad (33)$$

où nous avons utilisé le fait que la valeur moyenne sur le cercle du carré d'un sinus ou d'un cosinus vaut $1/2$, alors que celle du produit d'un sinus par un cosinus vaut zéro. Il en découle que :

$$\mathcal{P}_2(\eta_1, \varphi_1; \eta_2, \varphi_2) \propto \frac{1}{2} [1 + \eta_1 \eta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)] \quad (34)$$

Si maintenant nous normalisons à l'unité la somme des 4 probabilités obtenues pour $\eta_1 = \pm 1$ et $\eta_2 = \pm 1$, nous obtenons finalement :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_2(+1, +1) &= \mathcal{P}_2(-1, -1) = \frac{1}{2} \cos^2\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right) \\ \mathcal{P}_2(+1, -1) &= \mathcal{P}_2(-1, +1) = \frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right) \end{aligned} \quad (35)$$

Ces relations sont très semblables aux égalités (B-10) du Chapitre XXI, avec la seule substitution⁴ :

$$\begin{aligned} \varphi_1 &\Rightarrow \theta_A + \pi \\ \varphi_2 &\Rightarrow \theta_B \end{aligned} \quad (36)$$

Les angles φ_1 et φ_2 jouent donc ici le rôle des angles d'orientation des analyseurs de la Figure 2 de ce chapitre. Or nous savons (Chapitre XXI, § F-3) que ces égalités conduisent à des violations significatives des inégalités de Bell (dans un facteur $\sqrt{2}$), donc à des effets quantiques marqués de non-localité ; c'est donc également le cas ici.

Dans le cas général où N est quelconque, la mesure de la totalité des spins peut conduire à de fortes violations des inégalités de Bell, à condition de choisir des angles de mesures adaptés (le domaine angulaire dans lequel ces violations existent décroît comme l'inverse de la racine carrée de N lorsque ce nombre est grand [79]). Ces violations disparaissent cependant dès que certains spins ne sont plus mesurés (ou, ce qui revient au même, que les résultats correspondants ne sont plus pris en compte).

Conclusion

Ce complément illustre quelles sont les limites du phénomène étudié dans le complément précédent : le processus de mesures répétées fait effectivement apparaître une phase qui possède toutes les propriétés d'une phase classique, mais seulement jusqu'à un certain point. Lorsque toutes les particules sont mesurées, et

4. C'est le changement qui résulte du signe + dans l'état de spin (32), au lieu du signe - de l'état singulet.

pour certains choix particuliers des angles, des propriétés fortement quantiques de la phase ré-apparaissent.

De plus, on aurait pu croire que les propriétés quantiques extrêmes, en particulier leurs aspects non locaux discutés aux §§ F-1 et F-3 du Chapitre XXI, sont limitées aux systèmes à un petit nombre de particules, ou encore aux états de spin singulet ; ces derniers seraient en quelque sorte à part parmi tous les états accessibles à un système physique. Le présent complément montre qu'il n'en est rien : les mêmes propriétés existent pour des systèmes constitués d'un grand nombre de particules se trouvant dans un état quantique relativement simple (un double condensat).

Appendice IV

Intégrale de chemins de Feynman

1	Propagateur quantique d'une particule	704
1-a	Expression du propagateur comme une somme de produits	704
1-b	Calcul des éléments de matrice	705
2	Interprétation en termes d'histoires classiques	708
2-a	Expression du propagateur en fonction d'actions classiques	708
2-b	Généralisation : plusieurs particules interagissant par un potentiel	710
3	Discussion ; une nouvelle règle de quantification	710
3-a	Analogie avec l'optique classique	710
3-b	Une nouvelle règle de quantification	711
4	Opérateurs	712
4-a	Un seul opérateur	712
4-b	Plusieurs opérateurs	715

Dans le chapitre III, nous avons introduit les postulats de la mécanique quantique dans le cadre d'une approche hamiltonienne et de règles de quantification appliquées à des grandeurs hamiltoniennes conjuguées. Il est cependant possible d'introduire cette même mécanique quantique et ses règles de quantification d'une toute autre façon, à partir d'un lagrangien classique et de l'utilisation de l'intégrale de chemin de Feynman. Cette approche jette un éclairage intéressant sur les relations entre physique classique et quantique, qui rappellent celles entre l'optique géométrique et l'optique ondulatoire. De plus, il se trouve que cette approche est préférable dans un certain nombre de cas, en particulier ceux pour lesquels on dispose d'un lagrangien classique mais pas des grandeurs conjuguées permettant d'en déduire un hamiltonien¹.

Le but de cet appendice est de donner une introduction élémentaire à l'intégrale de chemin de Feynman et à quelques-unes de ses propriétés. La présentation sera faite sans souci de rigueur mathématique. Nous commençons au § 1 par étudier le propagateur quantique d'une particule, puis montrons au § 2 comment il peut être mis sous la forme d'une somme de contributions d'histoires (évolutions possibles) classiques du système physique. Ces résultats une fois acquis, nous discutons au § 3 comment il est possible de prendre le point de vue inverse, et de partir de ces sommes sur les histoires classiques pour en déduire la mécanique quantique habituelle, ses règles de quantification, ses propagateurs et, au § 4, ses opérateurs. Pour simplifier, nous nous limiterons à un ensemble de particules en interaction par un potentiel dépendant des positions ; pour l'étude d'un cas plus général (potentiel vecteur, invariance de jauge commutative ou non), le lecteur est invité à se reporter aux références [80], [81], ou [82].

1. Ceci se produit par exemple si le lagrangien ne dépend pas de la dérivée temporelle d'une coordonnée q_i , cas auquel on ne peut pas en déduire un moment conjugué p_i .

1. Propagateur quantique d'une particule

Considérons une particule sans spin. Le propagateur $G(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t)$ de cette particule est défini par :

$$G(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r}' | U(t', t) | \mathbf{r} \rangle \quad (1)$$

où les kets $|\mathbf{r}\rangle$ sont les kets propres de l'opérateur position et où $U(t', t)$ est l'opérateur d'évolution entre le temps initial t et le temps final t' (Complément F_{III}). Ce propagateur donne l'amplitude de probabilité pour que la particule, partant au temps t d'un état localisé au point \mathbf{r} , soit trouvée au point \mathbf{r}' après évolution entre les temps t et t' .

1-a. Expression du propagateur comme une somme de produits

Nous pouvons décomposer l'intervalle de temps $[t, t']$ en \mathcal{N} intervalles égaux, en posant :

$$\delta t = \frac{t' - t}{\mathcal{N}} \quad (2)$$

Nous introduisons ainsi $\mathcal{N} - 1$ temps intermédiaires $t_1, t_2, \dots, t_k, \dots, t_{\mathcal{N}-1}$ s'écrivant (Figure 1) :

$$t_k = t + k \delta t \quad k = 1, 2, \dots, \mathcal{N} - 1 \quad (3)$$

Il est également commode pour la suite de poser $t_0 = t$ et $t_{\mathcal{N}} = t'$. Nous pouvons alors décomposer $U(t', t)$ selon un produit de \mathcal{N} termes :

$$U(t', t) = U(t_{\mathcal{N}}, t_{\mathcal{N}-1}) \dots U(t_k, t_{k-1}) \dots U(t_2, t_1) U(t_1, t_0) \quad (4)$$

Entre chacun des opérateurs d'évolution, introduisons une relation de fermeture sur la base $\{|\mathbf{r}\rangle\}$:

$$\begin{aligned} U(t', t) = & \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \dots \int d^3 r_k \dots \int d^3 r_{\mathcal{N}-1} \\ & U(t_{\mathcal{N}}, t_{\mathcal{N}-1}) |\mathbf{r}_{\mathcal{N}-1}\rangle \langle \mathbf{r}_{\mathcal{N}-1}| U(t_{\mathcal{N}-1}, t_{\mathcal{N}-2}) |\mathbf{r}_{\mathcal{N}-2}\rangle \dots \\ & \langle \mathbf{r}_k | U(t_k, t_{k-1}) | \mathbf{r}_{k-1} \rangle \dots \langle \mathbf{r}_1 | U(t_1, t_0) \end{aligned} \quad (5)$$

Si nous reportons cette égalité dans (1), nous obtenons l'expression suivante du propagateur :

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t) = & \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \dots \int d^3 r_k \dots \int d^3 r_{\mathcal{N}-1} \\ & \langle \mathbf{r}' | U(t_{\mathcal{N}}, t_{\mathcal{N}-1}) | \mathbf{r}_{\mathcal{N}-1} \rangle \langle \mathbf{r}_{\mathcal{N}-1} | U(t_{\mathcal{N}-1}, t_{\mathcal{N}-2}) | \mathbf{r}_{\mathcal{N}-2} \rangle \dots \\ & \dots \langle \mathbf{r}_k | U(t_k, t_{k-1}) | \mathbf{r}_{k-1} \rangle \dots \langle \mathbf{r}_1 | U(t_1, t_0) | \mathbf{r} \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

Dans ce qui va suivre, nous allons faire tendre δt vers zéro (ou, si l'on préfère, \mathcal{N} vers l'infini). Le nombre d'intégrations sur les $d^3 r_k$ tend alors vers l'infini, mais les éléments de matrice sont alors ceux de l'opérateur d'évolution sur un temps infinitésimal δt .

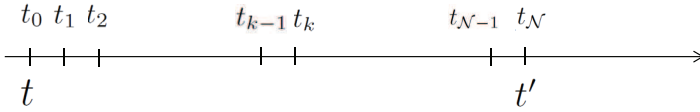


FIGURE 1 – Pour décomposer l’opérateur d’évolution en un produit d’opérateurs, on introduit entre les temps initial t et final t' toute une série de temps intermédiaires $t_1, t_2, \dots, t_k, \dots, t_{N-1}$, et l’on associe un opérateur d’évolution à chaque intervalle de temps. Pour chaque temps t_k une relation de fermeture fait ensuite apparaître une somme sur toutes les valeurs possibles \mathbf{r}_k de la position de la particule à cet instant.

1-b. Calcul des éléments de matrice

Il nous faut maintenant calculer les éléments de matrice $\langle \mathbf{r}_k | U(t_k, t_{k-1}) | \mathbf{r}_{k-1} \rangle$ de l’opérateur d’évolution, avec $t_k = t_{k-1} + \delta t$. L’hamiltonien H de la particule est la somme de l’énergie cinétique et de l’énergie associée à un potentiel extérieur :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R}) \tag{7}$$

où \mathbf{P} et \mathbf{R} sont respectivement les opérateurs impulsion et position de la particule ; m est sa masse.

α. Particule libre

Si la particule est libre, l’hamiltonien se réduit à l’énergie cinétique. Nous introduisons une relation de fermeture sur les états propres de l’impulsion et écrivons :

$$\langle \mathbf{r}_k | e^{-i\mathbf{P}^2 \delta t / 2m\hbar} | \mathbf{r}_{k-1} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1})} e^{-i\hbar k^2 \delta t / 2m} \tag{8}$$

Nous montrons ci-dessous que ce propagateur peut se calculer exactement, que l’intervalle de temps δt soit infinitésimal ou fini ; son expression est :

$$\langle \mathbf{r}_k | e^{-i\mathbf{P}^2 \delta t / 2m} | \mathbf{r}_{k-1} \rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar \delta t} \right)^{3/2} e^{-3i\pi/4} e^{im(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1})^2 / 2\hbar \delta t} \tag{9}$$

Supposons pour un instant que l’on remplace dans l’exposant de la dernière exponentielle le facteur i par un simple signe moins (ce qui revient à passer en temps imaginaire). A un coefficient numérique près, le propagateur de la particule libre devient alors une fonction gaussienne, qui décroît rapidement dès que la distance $|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}|$ devient grande devant sa largeur $\sqrt{2\hbar \delta t / m}$.

Remarque :

Ce résultat n’est pas surprenant car, si l’on remplace dans l’équation de Schrödinger le temps réel t par un temps imaginaire it , on obtient l’équation de diffusion dont le propagateur est effectivement une gaussienne. La largeur de cette dernière tend

vers zéro lorsque $\delta t \rightarrow 0$: comme on pouvait s'y attendre, la particule ne peut se propager que sur une distance d'autant plus faible que le temps δt est court. Un point remarquable, cependant, est que cette distance n'est pas proportionnelle à δt , mais à la racine carrée de ce temps; en d'autres termes, pour les temps courts, la particule peut se propager bien plus loin que si elle avait une vitesse constante. Cette situation est caractéristique d'un mouvement aléatoire, et rappelle de près ce qui se produit pour l'équation classique de diffusion, dont le propagateur possède la même propriété.

Pour l'équation de Schrödinger elle-même (sans passage au temps imaginaire), au lieu d'une diminution de module du propagateur lorsque la distance $|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}|$ augmente, on obtient une oscillation d'autant plus rapide que la distance est plus grande; ces oscillations sont également plus rapides lorsque δt est petit. Nous discutons plus bas comment toutes ces phases interfèrent, ainsi que le rôle particulier des phases associées aux chemins classiques.

Démonstration de la relation (9) :

Nous modifions l'exposant de la fonction à intégrer dans (8) en y faisant apparaître un carré parfait :

$$\frac{\hbar \delta t}{2m} \mathbf{k}^2 + \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}) = \frac{\hbar \delta t}{2m} \left[\mathbf{k} + \frac{m}{\hbar \delta t} (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}) \right]^2 - \frac{m}{2\hbar \delta t} (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1})^2 \quad (10)$$

Effectuons alors le changement de variable :

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} + \frac{m}{\hbar \delta t} (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}) \quad (11)$$

qui nous conduit à :

$$\langle \mathbf{r}_k | e^{-i\mathbf{P}^2 \delta t / 2m\hbar} | \mathbf{r}_{k-1} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \left[\int d^3q e^{-i\hbar q^2 \delta t / 2m} \right] \times e^{im(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1})^2 / 2\hbar \delta t} \quad (12)$$

L'intégrale qui subsiste entre crochets au second membre est maintenant un nombre indépendant de \mathbf{r}_k et \mathbf{r}_{k-1} ; comme les trois composantes du vecteur \mathbf{q} contribuent de la même façon, ce nombre est le cube de l'intégrale :

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dq_x e^{-i\hbar q_x^2 \delta t / 2m} \quad (13)$$

Selon un procédé classique, nous calculons le carré de cette intégrale I en passant en coordonnées polaires $\rho = \sqrt{q_x^2 + s_x^2}$:

$$\begin{aligned} I^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dq_x \int_{-\infty}^{+\infty} ds_x e^{-i\hbar(q_x^2 + s_x^2)\delta t / 2m} \\ &= 2\pi \int_0^\infty \rho d\rho e^{-i\hbar\rho^2 \delta t / 2m} = \pi \frac{2im}{\hbar \delta t} \left[e^{-i\infty} - 1 \right] \end{aligned} \quad (14)$$

Bien sûr, l'écriture du nombre $e^{-i\infty}$ n'a aucun sens mathématique : l'exponentielle imaginaire e^{iM} oscille indéfiniment entre +1 et -1 lorsque $M \rightarrow \infty$, autour d'une valeur moyenne nulle. Nous prendrons donc ce nombre simplement égal à cette valeur moyenne nulle², de sorte que :

$$I = \sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar \delta t}} e^{-i\pi/4} \quad (15)$$

2. On peut arriver à ce résultat en ajoutant une petite partie imaginaire $-i\epsilon$ au coefficient $\hbar^2 \delta t / 2m$ de ρ^2 dans l'exposant. Avec cette partie imaginaire, même infinitésimale, le terme oscillant disparaît effectivement.

Si nous remplaçons par I l'intégrale sur d^3q de (12), nous retrouvons (9).

$\beta.$ Effets du potentiel extérieur

Nous devons maintenant calculer les éléments de matrice de l'opérateur exponentiel $e^{-iH\delta t/\hbar}$ lorsque H est la somme de deux opérateurs qui ne commutent pas. Nous nous limiterons au cas où δt est infinitésimal. L'exponentielle d'une somme d'opérateurs A et B s'écrit :

$$e^{-i(A+B)\delta t} = 1 - i[A + B]\delta t - [A^2 + AB + BA + B^2] \frac{\delta t^2}{2} + 0(\delta t^3) \quad (16)$$

Calculons d'autre part le produit d'exponentielles :

$$\begin{aligned} e^{-iA\delta t/2} e^{-iB\delta t} e^{-iA\delta t/2} &= \left[1 - iA \frac{\delta t}{2} - A^2 \frac{\delta t^2}{8} + \dots \right] \times \\ &\quad \left[1 - iB\delta t - B^2 \frac{\delta t^2}{2} + \dots \right] \left[1 - iA \frac{\delta t}{2} - A^2 \frac{\delta t^2}{8} + \dots \right] \end{aligned} \quad (17)$$

soit :

$$\begin{aligned} e^{-iA\delta t/2} e^{-iB\delta t} e^{-iA\delta t/2} &= 1 - i[A + B]\delta t \\ &\quad - \left[\frac{A^2}{2} + \frac{A^2}{2} + \frac{B^2}{2} + \frac{B^2}{2} + AB + BA \right] \frac{\delta t^2}{2} + 0(\delta t^3) \\ &= e^{-i(A+B)\delta t} + 0(\delta t^3) \end{aligned} \quad (18)$$

Si nous posons $A = \mathbf{P}^2/2m\hbar$ et $B = V(\mathbf{R})/\hbar$, nous obtenons, si δt est infinitésimal de sorte que les termes en δt^3 sont négligeables :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_k | U(t_k, t_{k-1}) | \mathbf{r}_{k-1} \rangle &= \langle \mathbf{r}_k | e^{-iV(\mathbf{R})\delta t/2\hbar} e^{-i\mathbf{P}^2\delta t/2m\hbar} e^{-iV(\mathbf{R})\delta t/2\hbar} | \mathbf{r}_{k-1} \rangle \\ &= e^{-i[V(\mathbf{r}_k)+V(\mathbf{r}_{k-1})]\delta t/2\hbar} \langle \mathbf{r}_k | e^{-i\mathbf{P}^2\delta t/2m\hbar} | \mathbf{r}_{k-1} \rangle \end{aligned} \quad (19)$$

Ce résultat est simplement le produit d'une exponentielle contenant le potentiel par un terme qui n'est autre que le propagateur de la particule libre. Compte tenu de (12), nous obtenons ainsi :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_k | U(t_{k-1}, t_k) | \mathbf{r}_{k-1} \rangle &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar\delta t} \right)^{3/2} e^{-3i\pi/4} e^{im(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1})^2/2\hbar\delta t} \times e^{-i[V(\mathbf{r}_k)+V(\mathbf{r}_{k-1})]\delta t/2\hbar} \end{aligned} \quad (20)$$

L'effet du potentiel extérieur n'est donc pas compliqué : il ajoute une exponentielle contenant la moitié de la somme des deux énergies potentielles associées à la position du bra et à celle du ket.

$\gamma.$ Expression finale

Si nous reportons (20) dans (5), nous obtenons l'expression suivante du propagateur :

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t) &= \left(\frac{e^{-i\pi/2} m}{2\pi\hbar\delta t} \right)^{3N/2} \int d^3r_1 \int d^3r_2 \dots \int d^3r_k \dots \int d^3r_{N-1} \\ &\quad \exp \left\{ i \sum_{k=1}^{N-1} \left[\frac{m(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1})^2}{2\hbar\delta t} + \frac{V(\mathbf{r}_k) + V(\mathbf{r}_{k-1})}{2\hbar} \delta t \right] \right\} \end{aligned} \quad (21)$$

Cette égalité est valable à la limite $\delta t \rightarrow 0$ (ou $\mathcal{N} \rightarrow \infty$) puisque, pour écrire (19), nous avons négligé des termes en δt^3 .

2. Interprétation en termes d'histoires classiques

L'amplitude probabilité (6) s'obtient en substituant les éléments de matrice (20) du propagateur autant de fois que nécessaire. Elle contient donc autant de sommes sur des positions intermédiaires qu'il y a de temps intermédiaires t_i , donc un nombre infini à la limite $\delta t \rightarrow 0$. Cette expression, qui peut paraître compliquée, s'interprète en réalité simplement en termes de somme sur des chemins classiques que peut suivre la particule entre les deux temps extrêmes.

2-a. Expression du propagateur en fonction d'actions classiques

Revenons donc à la physique classique et considérons pour un instant tous les \mathbf{r}_k comme fixés, et une particule qui occuperait ces positions successives aux instants t_k . Entre deux de ces instants, nous supposons qu'elle conserve une vitesse constante égale à :

$$\mathbf{v}_k = \frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}}{\delta t} \quad (22)$$

Ceci définit un chemin classique Γ , avec une interpolation linéaire pour les temps intermédiaires entre les temps t_k (cf. Figure 2). Le lagrangien \mathcal{L} de la particule est :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 - V(\mathbf{r}) \quad (23)$$

Pour tout chemin classique Γ suivi par la particule entre les temps initial t et final t' , position et vitesse sont une fonction du temps, et il en est donc de même du lagrangien $\mathcal{L}(t)$; l'action correspondante s'écrit (Appendice III, § 5.b) :

$$S_\Gamma = \int_t^{t'} dt'' \mathcal{L}(t'') \quad (24)$$

Calculons cette intégrale par la méthode de Riemann en introduisant entre les temps t et t' \mathcal{N} intervalles de longueur δt ; nous considérons que, pendant l'intervalle de temps infinitésimal δt , l'énergie potentielle est approximée par la demi-somme de ses valeurs aux extrémités de l'intervalle. Nous obtenons alors :

$$S_\Gamma \simeq \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} \delta t \left\{ \left[\frac{m (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1})^2}{2 \delta t^2} \right] - \frac{V(\mathbf{r}_{k-1}) + V(\mathbf{r}_k)}{2} \right\} \quad (25)$$

l'égalité approchée devenant exacte à la limite $\delta t \rightarrow 0$.

Nous reconnaissons alors dans le second membre de cette égalité (à un facteur i/\hbar près) l'exposant de l'expression (21) du propagateur quantique; ce dernier contient donc l'exponentielle d'une valeur approchée de l'action classique, multipliée par i/\hbar . A la limite $\delta t \rightarrow 0$ (et donc $\mathcal{N} \rightarrow \infty$), cette valeur approchée devient exacte ³,

3. Rappelons que ce complément ne prétend pas à la rigueur mathématique. Ceci nécessiterait une étude plus soignée des expressions classiques comme quantiques, et des effets des deux limites simultanées $\delta t \rightarrow 0$ et du nombre de termes \mathcal{N} des produits qui tend vers l'infini, sachant que des approximations sont faites pour des fonctions qui sont des exposants.

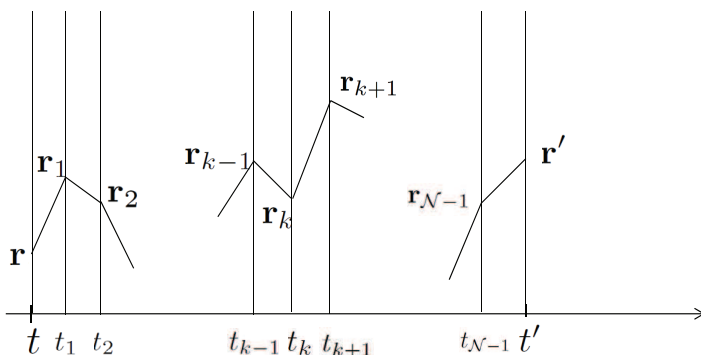


FIGURE 2 – Un chemin de Feynman est obtenu en attribuant une position \mathbf{r}_k à chaque instant t_k . Le chemin ainsi obtenu est continu, mais se présente en général comme un zigzag (la vitesse est discontinue à tous les temps t_k). On peut cependant associer une action classique à chacun de ces chemins, et obtenir le propagateur quantique en sommant les exponentielles des actions de tous les chemins classiques ; les deux positions \mathbf{r} et \mathbf{r}' sont maintenues fixes, et les sommations sont effectuées sur toutes les positions intermédiaires $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_{N-1}$.

et les sommes sur $d^3r_1, d^3r_2, \dots, d^3r_{N-1}$ au second membre de (21) introduisent une somme sur tous les chemins reliant \mathbf{r}, t à \mathbf{r}', t' :

$$\sum_{\text{chemins } \Gamma} \exp \left[\frac{iS_\Gamma}{\hbar} \right] \quad (26)$$

Pour donner un sens à cette somme sur les chemins, il faut cependant choisir une “densité de chemins” ; nous supposons donc que le nombre de chemins dans un “intervalle de chemins” déterminé par l’ensemble des d^3r_k est donné par le produit $C^{3N/2} \times d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_k \dots d^3r_{N-1}$, où C est la constante (inverse d’une longueur) :

$$C = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar \delta t}} \quad (27)$$

Ceci nous permet d’obtenir :

$$G(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r}' | U(t', t) | \mathbf{r} \rangle = \sum_{\text{chemins } \Gamma} \exp \left[\frac{iS_\Gamma}{\hbar} \right] \quad (28)$$

A la limite $\delta t \rightarrow 0$, la somme sur les chemins n’est bien sûr plus réellement une somme discrète. C’est pourquoi, au lieu de (28), on écrit souvent :

$$\langle \mathbf{r}' | U(t', t) | \mathbf{r} \rangle = \int \mathcal{D}[\mathbf{r}(t)] \exp \left[\frac{iS_\Gamma}{\hbar} \right] \quad (29)$$

où la notation $\mathcal{D}[\mathbf{r}(t)]$ symbolise la limite d’une somme sur les chemins :

$$\mathcal{D}[\mathbf{r}(t)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar \delta t}} \right]^{3N/2} \int d^3r_1 \int d^3r_2 \dots \int d^3r_k \dots \int d^3r_{N-1} \quad (30)$$

2-b. Généralisation : plusieurs particules interagissant par un potentiel

Les considérations précédentes se généralisent directement à un système de plusieurs particules interagissant par un potentiel qui dépend de leurs positions. La structure de l'hamiltonien est en effet, comme plus haut, la somme de deux termes qui ne commutent pas, ce qui conduit à utiliser l'expression approchée (18) de l'opérateur d'évolution. Au lieu d'insérer des relations de fermeture sur une seule position, il faut maintenant utiliser une base mettant en jeu les positions de toutes les particules : chaque intégrale sur d^3r se démultiplie donc en autant d'intégrales que le système comprend de particules.

Nous ne traiterons pas le cas où les particules sont chargées et soumises à un champ magnétique, ce qui conduit à l'introduction de termes du type $\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})$, où $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ est le potentiel vecteur. C'est un cas intéressant, en particulier par le lien qu'il fait avec l'invariance de jauge, mais nous ne l'aborderons pas par souci de brièveté. Le lecteur intéressé se reportera aux ouvrages suggérés dans l'introduction.

3. Discussion ; une nouvelle règle de quantification

La méthode des chemins se prête particulièrement bien à développer une analogie avec l'optique classique. De plus, elle permet surtout de construire de nouvelles règles de quantification. Nous abordons maintenant successivement ces deux sujets.

3-a. Analogie avec l'optique classique

Les relations (28) et (29) permettent de faire un lien entre deux grandeurs qui, a priori, semblent sans relation : les chemins de la mécanique classique avec les actions associées, et le propagateur quantique. Ce dernier permet, connaissant la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}, t)$ à un instant t , de la calculer à un instant ultérieur t' selon :

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}', t') &= \langle \mathbf{r}' | \Psi(t') \rangle = \langle \mathbf{r}' | U(t', t) | \Psi(t) \rangle \\ &= \int d^3r \langle \mathbf{r}' | U(t', t) | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \Psi(t) \rangle \end{aligned} \tag{31}$$

soit, compte tenu de la définition (1) du propagateur :

$$\Psi(\mathbf{r}', t') = \int d^3r G(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \tag{32}$$

Le propagateur est donc le noyau de l'équation intégrale qui exprime la propagation dans le temps de la fonction d'onde. Or l'égalité (28) montre qu'il est donné par une somme d'exponentielles des actions prise sur tous les chemins classiques. Donc, si en mécanique classique un chemin unique est sélectionné par la condition de stationnarité de l'action (ou, dans certains cas, un nombre fini de tels chemins rendant l'action stationnaire), en mécanique quantique tous les chemins interviennent pour déterminer l'amplitude de propagation, chacun avec sa phase propre. On peut dire en quelque sorte que, en mécanique quantique, la particule passe par toutes les positions intermédiaires possibles \mathbf{r}_k et donc suit toutes les histoires possibles entre les deux points extrêmes.

Il est remarquable que toutes ces histoires contribuent avec la même amplitude (même des histoires peu vraisemblables parce que faisant intervenir des positions totalement arbitraires) ; seules les phases associées aux histoires diffèrent entre elles et

permettent de comprendre leurs rôles. C'est une situation que l'on peut analyser en termes de conditions de phase stationnaire : dans la somme, on comprend que les histoires pour lesquelles l'action est stationnaire jouent un rôle particulier, puisque toutes les histoires voisines vont ajouter leur contribution de façon cohérente. En revanche, au voisinage des histoires pour lesquelles l'action varie rapidement, un brouillage rapide de phases se produit de sorte que la contribution correspondante est pratiquement annulée par effet d'interférences destructives. Les histoires classiques jouent ainsi un rôle privilégié, et ceci de façon d'autant plus prononcée que les oscillations de phase sont rapides. A la limite où $\hbar \rightarrow 0$, ces oscillations sont infiniment rapides et seules subsistent les histoires classiques.

Pour finir, la situation rappelle l'optique classique et le principe de Huyghens-Fresnel, qui permet de calculer l'onde lumineuse comme une somme d'ondes rayonnées par tous les points d'une surface intermédiaire, en tenant compte des phases liées à la propagation le long de chaque chemin. Dans l'approximation de l'optique géométrique où la longueur d'onde tend vers zéro, les rayons lumineux sont les trajets selon lesquels la phase du chemin est stationnaire par rapport aux chemins infiniment voisins. L'optique géométrique est alors l'analogie de la mécanique classique, et l'optique ondulatoire de Huyghens l'analogie de la mécanique quantique. On comprend donc que l'intégrale de chemin de Feynman soit un outil commode pour étudier les liens entre mécanique classique et quantique, en particulier la limite semi-classique de la mécanique quantique (approximation WKB, etc.).

Remarque :

L'analogie précédente s'applique bien au cas d'une particule unique. Pour un système de N particules, les histoires ne se propagent plus dans l'espace ordinaire à 3 dimensions, mais dans l'espace des configurations à $3N$ dimensions. L'analogie avec l'optique signalée plus haut s'estompe alors, puisqu'en optique classique les ondes électromagnétiques se propagent dans l'espace ordinaire.

3-b. Une nouvelle règle de quantification

A ce stade, nous pouvons inverser la démarche. Nous sommes en effet partis des règles de la mécanique quantique hamiltonienne et en avons déduit une expression équivalente du propagateur, donc une autre façon de trouver les solutions de l'équation de Schrödinger. Mais il est également possible de considérer cette expression équivalente comme le point de départ, et donc de postuler que le propagateur est défini ab initio par une somme sur tous les chemins classiques Γ , qui chacun contribuent par une exponentielle $\exp(iS_\Gamma/\hbar)$. On obtient ainsi une autre méthode de quantification d'un système physique, qui présente plusieurs avantages. En premier lieu, comme nous l'avons vu, elle met bien en évidence la relation entre mécanique classique, où existe un chemin classique unique (ou parfois nombre fini de chemins) qui contraste avec une infinité de chemins possibles en mécanique quantique. En second lieu, il est remarquable que les amplitudes de probabilités ainsi obtenues s'expriment à partir de fonctions classiques (où n'interviennent que des nombres et pas des opérateurs), la seule composante quantique explicite étant la présence de \hbar au dénominateur de la phase ; nous verrons au § 4 comment introduire la notion d'opérateur dans cette approche. Ensuite, les expressions en termes d'intégrales de chemin sont symétriques en temps et espace, puisque les deux types de coordon-

nées sont intégrées de la même façon⁴. Raisonner directement dans l'espace-temps permet un passage plus aisé à la relativité d'Einstein, puisqu'on peut remplacer la différentielle de temps δt par une différentielle de temps propre $\delta\tau$; si alors le lagrangien \mathcal{L} est un scalaire d'espace-temps, l'action devient également un scalaire, et la théorie acquiert l'invariance relativiste requise. Enfin, la méthode de quantification de Feynman ne requiert que l'existence d'un lagrangien et du principe variationnel associé. Or tous les systèmes physiques régis par un lagrangien n'ont pas nécessairement les variables conjuguées qui permettent de passer à leur hamiltonien ; pour de tels systèmes, la méthode des chemins de Feynman est puissante, et c'est la raison de son rôle important en théorie quantique des champs.

4. Opérateurs

Les chemins de Feynman permettent également de définir la valeur des éléments de matrice d'opérateurs dans le point de vue de Heisenberg, où ils dépendent du temps. Nous nous limiterons au cas le plus simple, celui où le ou les opérateurs sont des fonctions de l'opérateur position \mathbf{R} .

4-a. Un seul opérateur

Insérons un opérateur quelconque A "au milieu" de l'opérateur d'évolution de (1) en découpant l'intervalle de temps $[t, t']$ en deux intervalles complémentaires $[t, t'']$ et $[t'', t']$, avec $t < t'' < t'$. Nous obtenons l'expression :

$$\langle \mathbf{r}' | U(t', t'') A U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle = \langle \theta(\mathbf{r}', t'', t') | A | \theta(\mathbf{r}, t'', t) \rangle \quad (33)$$

avec :

$$\begin{aligned} |\theta(\mathbf{r}, t'', t)\rangle &= U(t'', t) |\mathbf{r}\rangle \\ |\theta(\mathbf{r}', t'', t')\rangle &= U^\dagger(t', t'') |\mathbf{r}'\rangle = U(t'', t') |\mathbf{r}'\rangle \end{aligned} \quad (34)$$

Dans cet élément de matrice de A , le ket $|\theta(\mathbf{r}, t'', t)\rangle$ est obtenu par évolution jusqu'au temps t'' d'un état localisé en \mathbf{r} à l'instant t ; le bra $\langle \theta(\mathbf{r}', t'', t') |$ correspond au ket $|\theta(\mathbf{r}', t'', t')\rangle$ qui, lorsqu'il évolue entre t'' et t' , devient un ket localisé en \mathbf{r}' :

$$U(t', t'') |\theta(\mathbf{r}', t'', t')\rangle = U(t', t'') U(t'', t') |\mathbf{r}'\rangle = |\mathbf{r}'\rangle \quad (35)$$

$\alpha.$ Opérateur fonction de la position

Supposons maintenant que A soit une fonction $A(\mathbf{R})$ de l'opérateur de position de la particule. Insérant une relation de fermeture sur les positions, nous pouvons écrire le premier membre de (33) sous la forme :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}' | U(t', t'') A(\mathbf{R}) U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle \\ = \int d^3 r'' \langle \mathbf{r}' | U(t', t'') | \mathbf{r}'' \rangle A(\mathbf{r}'') \langle \mathbf{r}'' | U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle \end{aligned} \quad (36)$$

4. La somme sur tous les chemins introduit une intégrale sur toutes les positions \mathbf{r}_k de la Figure 2, donc les différentielles des trois coordonnées ; l'intégrale sur les temps introduit une différentielle $dt = t_k - t_{k-1}$. En tout on a donc le produit de trois différentielles d'espace par une différentielle du temps, ce qui introduit une différentielle de volume d'espace-temps.

La relation générale (28) nous permet alors d'écrire les deux propagateurs comme des sommes respectives sur tous les chemins Γ_1 qui joignent la position initiale \mathbf{r} à l'instant t à la position intermédiaire \mathbf{r}'' à l'instant t'' , et les chemins Γ_2 joignant ensuite la position intermédiaire \mathbf{r}'' à l'instant t'' à la position finale \mathbf{r}' à l'instant t' :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}'' | U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle &= \sum_{\text{chemins } \Gamma_1} \exp \left[\frac{iS_{\Gamma_1}}{\hbar} \right] \\ \langle \mathbf{r}' | U(t', t'') | \mathbf{r}'' \rangle &= \sum_{\text{chemins } \Gamma_2} \exp \left[\frac{iS_{\Gamma_2}}{\hbar} \right] \end{aligned} \quad (37)$$

Si t'' est pris égal au temps intermédiaire t_k , la relation (36) devient :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}' | U(t', t'') A(\mathbf{R}) U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle \\ = \int d^3 r_k \sum_{\text{chemins } \Gamma_1 \text{ et } \Gamma_2} \exp \left[\frac{iS_{\Gamma_2}}{\hbar} \right] A(\mathbf{r}_k) \exp \left[\frac{iS_{\Gamma_1}}{\hbar} \right] \end{aligned} \quad (38)$$

Mais le produit de ces deux termes donne l'exponentielle $\exp[iS_{\Gamma}/\hbar]$ associée à l'action S_{Γ} d'un chemin Γ constitué des deux chemins Γ_1 et Γ_2 mis bout à bout en \mathbf{r}_k . La somme sur $d^3 r_k$ reconstitue alors l'ensemble des chemins reliant la position initiale \mathbf{r} à l'instant t à la position finale \mathbf{r}' à l'instant t' , la seule différence étant que maintenant chaque exponentielle $\exp[iS_{\Gamma}/\hbar]$ est multipliée par la valeur $A(\mathbf{r}_k)$ que prend la fonction A au point intermédiaire à l'instant t_k .

Pour finir, nous obtenons :

$$\langle \mathbf{r}' | U(t', t'') A(\mathbf{R}) U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle = \sum_{\text{chemins } \Gamma} A(\mathbf{r}'') \exp \left[\frac{iS_{\Gamma}}{\hbar} \right] \quad (39)$$

où $A(\mathbf{r}'')$ est la valeur de $A(\mathbf{r})$ pour la position \mathbf{r}'' par laquelle passe le chemin Γ au temps t'' . Les éléments de matrice de l'opérateur en représentation de Heisenberg sont donc donnés par la même somme sur les histoires que le propagateur, la seule différence étant que la contribution de chaque chemin est maintenant multipliée par la valeur de la fonction de la position à l'instant intermédiaire t'' .

Comme plus haut, nous pouvons inverser la démarche, et considérer que la relation (39) constitue la définition d'un opérateur dans le cadre de la méthode de quantification des chemins de Feynman. Ici aussi, il est remarquable que l'expression obtenue ne fasse intervenir que des fonctions classiques, sans aucun opérateur.

β. Opérateur vitesse; relations de commutation canoniques

Pour définir un opérateur \mathbf{W} associé à la vitesse de la particule à l'instant t'' (nous prenons la notation \mathbf{W} pour éviter une confusion avec le potentiel V), et compte tenu de (22), un prolongement naturel de (38) conduit à poser :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}' | U(t', t'') \mathbf{W} U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle \\ = \int d^3 r_k \sum_{\text{chemins } \Gamma_2} \exp \left[\frac{iS_{\Gamma_2}}{\hbar} \right] \sum_{\text{chemins } \Gamma_1} \left(\frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}}{\delta t} \right) \exp \left[\frac{iS_{\Gamma_1}}{\hbar} \right] \end{aligned} \quad (40)$$

où les chemins Γ_1 sont tous ceux qui relient la position initiale \mathbf{r} à la position intermédiaire \mathbf{r}_k (la position intermédiaire précédente \mathbf{r}_{k-1} dépend donc du chemin), tandis que les chemins Γ_2 sont tous ceux qui relient \mathbf{r}_k à la position finale \mathbf{r}' . Si l'on introduit au milieu du membre de gauche une relation de fermeture sur les kets $\{|\mathbf{r}_k\rangle\}$, cette relation devient :

$$\begin{aligned} \int d^3r_k \langle \mathbf{r}' | U(t', t'') | \mathbf{r}_k \rangle \langle \mathbf{r}_k | \mathbf{W} U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle \\ = \int d^3r_k \langle \mathbf{r}' | U(t', t'') | \mathbf{r}_k \rangle \Psi_W(\mathbf{r}_k, t'') \end{aligned} \quad (41)$$

avec :

$$\Psi_W(\mathbf{r}_k, t'') = \langle \mathbf{r}_k | \mathbf{W} U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle = \sum_{\text{chemins } \Gamma_1} \left(\frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}}{\delta t} \right) \exp \left[\frac{iS_{\Gamma_1}}{\hbar} \right] \quad (42)$$

Cette fonction d'onde est celle obtenue par effet de l'opérateur \mathbf{W} sur la fonction d'onde à l'instant t'' :

$$\Psi(\mathbf{r}_k, t'') = \langle \mathbf{r}_k | U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle \quad (43)$$

Comparons la somme sur les chemins Γ_1 de (42) à celle de (28), qui construit le propagateur entre les temps t et t'' . Dans ces égalités, les actions sont données par les sommes (25) sur les positions intermédiaires. Pour la contribution des chemins entre le temps initial t et le temps intermédiaire t_{k-1} (le dernier temps sur lequel il faut sommer), les deux sommes de (42) et (28) sont identiques. En fait, elles ne diffèrent que par la contribution du tout dernier intervalle de temps (celui entre t_{k-1} et $t_k = t''$), qui dans (42) est multipliée par le facteur $(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1})/\delta t$. Or on peut également faire apparaître ce facteur en dérivant (28) par rapport à \mathbf{r}_k puisque, selon (25) :

$$\nabla_{\mathbf{r}_k} \langle \mathbf{r}_k | U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle = \frac{i\delta t}{\hbar} \sum_{\text{chemins } \Gamma_1} \left[m \left(\frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}}{\delta t^2} \right) + \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}_k} V \right] \exp \left[\frac{iS_{\Gamma_1}}{\hbar} \right] \quad (44)$$

Le terme en $\nabla_{\mathbf{r}_k} V$ dans le second membre peut être sorti de la somme sur les chemins, puisque \mathbf{r}_k est un point final fixe; il fournit une contribution en $\delta t \times \nabla_{\mathbf{r}_k} V$ qui s'annule à la limite où $\delta t \rightarrow 0$. Il reste alors :

$$\nabla_{\mathbf{r}_k} \langle \mathbf{r}_k | U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle = \frac{im}{\hbar} \sum_{\text{chemins } \Gamma_1} \left(\frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}}{\delta t} \right) \exp \left[\frac{iS_{\Gamma_1}}{\hbar} \right] \quad (45)$$

de sorte que la relation (42) devient :

$$\Psi_W(\mathbf{r}_k, t'') = \frac{\hbar}{im} \nabla_{\mathbf{r}_k} \langle \mathbf{r}_k | U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle = \frac{\hbar}{im} \nabla_{\mathbf{r}_k} \Psi(\mathbf{r}_k, t'') \quad (46)$$

Ainsi, l'effet de l'opérateur vitesse \mathbf{W} est-il simplement proportionnel à une dérivation⁵ par rapport à la position \mathbf{r}_k , qui est la variable de la fonction d'onde à l'instant

5. Nous avons effectué la démonstration en considérant une fonction d'onde à l'instant t'' qui est issue d'une fonction d'onde localisée au point \mathbf{r} à l'instant t . Mais, par superposition linéaire, on peut généraliser à une fonction d'onde quelconque à l'instant t et retrouver la même propriété de dérivation.

t'' . Il est équivalent de dire que, si $\mathbf{P} = m\mathbf{W}$ est l'opérateur impulsion de la particule, l'effet de ce dernier sur la fonction d'onde est (\hbar/i) fois le gradient par rapport à la position ; on retrouve ainsi un résultat de base de la mécanique quantique habituelle à partir de l'introduction des opérateurs par les intégrales de chemin.

Les relations de commutation canoniques entre \mathbf{R} et \mathbf{P} en découlent alors immédiatement, puisque :

$$\frac{\partial}{\partial x} [x\Psi(x)] = x \frac{\partial}{\partial x} [\Psi(x)] + \Psi(x) \tag{47}$$

Ces relations de commutation peuvent donc, elles aussi, être considérées comme des conséquences des règles de quantification des chemins.

4-b. Plusieurs opérateurs

Montrons maintenant comment les postulats de Feynman permettent d'introduire des produits de plusieurs opérateurs, agissant au même instant ou à des temps différents.

α. Plusieurs opérateurs à des temps différents

Le raisonnement précédent se généralise à plusieurs opérateurs $A(\mathbf{R})$, $B(\mathbf{R})$ agissant à des temps intermédiaires t'' , t''' , etc. Comme plus haut, on découpe l'opérateur d'évolution en plusieurs parties correspondant aux tranches de temps successives, et on introduit des relations de fermeture sur la position à tous les temps intermédiaires. Chaque opérateur introduit alors un facteur qui dépend de la position intermédiaire correspondante, et la propagation entre les temps une somme sur les histoires dans les tranches de temps successives. Le même raisonnement que plus haut conduit à :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}' | U(t', t''') B(\mathbf{R}) U(t''', t'') A(\mathbf{R}) U(t'', t) | \mathbf{r} \rangle \\ = \sum_{\text{chemins } \Gamma} A(\mathbf{r}'') B(\mathbf{r}''') \dots \exp \left[\frac{iS_{\Gamma}}{\hbar} \right] \end{aligned} \tag{48}$$

où $A(\mathbf{r}'')$ est la valeur de A pour la position \mathbf{r}'' par laquelle passe le chemin Γ au temps t'' , $B(\mathbf{r}''')$ la valeur de B pour la position \mathbf{r}''' par laquelle passe le chemin Γ au temps t''' , etc. Il est à noter que l'ordre dans lequel sont rangés les opérateurs dans l'élément de matrice du premier membre n'est pas quelconque : il correspond à celui dans lequel sont rangés les temps t'' , t''' , etc. dans les histoires classiques qui servent à calculer les actions. Cette définition range donc automatiquement les opérateurs par temps décroissants de la gauche vers la droite.

β. Opérateurs position et vitesse, symétrisation

Supposons maintenant que, par exemple, nous voulions introduire l'opérateur correspondant au produit $\mathbf{R} \cdot \mathbf{P}$ de la position par l'impulsion. Nous procédons alors comme en (41) et (42), avec toutefois une précaution supplémentaire : on peut en effet se demander s'il faut multiplier $(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1})/\delta t$ par \mathbf{r}_k ou par \mathbf{r}_{k-1} (peu importe que la multiplication se fasse à droite ou à gauche, puisqu'il s'agit de nombres). Pour

obtenir une plus grande symétrie, nous multiplions par la demi-somme, de sorte que dans (42) $(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1})/\delta t$ est remplacé par :

$$\frac{1}{\delta t} \frac{\mathbf{r}_k + \mathbf{r}_{k-1}}{2} \cdot (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}) = \frac{1}{2\delta t} [(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}) \cdot \mathbf{r}_k + \mathbf{r}_{k-1} \cdot (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1})] \quad (49)$$

(au second membre, nous avons écrit les deux termes de façon que les temps soient toujours croissants de gauche à droite). A cause de l'ordre des indices k , le premier terme du second membre introduit l'opérateur $\mathbf{W} \cdot \mathbf{R}$, alors que le second introduit $\mathbf{R} \cdot \mathbf{W}$, c'est-à-dire les mêmes opérateurs dans l'ordre inverse. On voit ainsi comment la méthode des chemins conduit tout naturellement à une symétrisation de l'ordre des opérateurs, ce qui préserve automatiquement l'hermiticité du produit.

Conclusion

Avoir à sa disposition deux approches complémentaires, la méthode hamiltonienne et celle de l'intégrale de chemin, s'avère souvent précieux dans l'étude de nombreux problèmes physiques. C'est le cas en particulier en théorie des champs, où les intégrales de chemin jouent un rôle fondamental. Elles sont en fait à la base d'une grande partie de la mise en œuvre de symétries de groupes (abéliens ou non commutatifs) dans cette théorie, qui permet de construire une théorie des particules élémentaires et de leurs interactions. Mais il existe d'autres cas où l'utilisation des intégrales de chemin s'avère très commode, comme dans les calculs d'interférence quantique avec des atomes froids. Conceptuellement, la méthode des chemins apporte également un éclairage nouveau sur les liens entre la mécanique quantique et la mécanique classique et, comme nous l'avons vu au § 3-a, l'optique classique.

Nous nous sommes limités dans ce complément à l'utilisation de l'intégrale de chemin comme méthode de calcul du propagateur dans le temps d'un système physique quantique, c'est-à-dire aux exponentielles imaginaires de l'hamiltonien. L'intégrale de chemin est cependant tout aussi utile en mécanique statistique quantique (Appendice VI), où interviennent des exponentielles réelles de l'hamiltonien (multiplié par l'inverse de la température). Elle y fournit par exemple l'outil de base de nombreux calculs numériques ; le lecteur intéressé par ce domaine pourra consulter l'ouvrage de Zinn-Justin [81], ou la référence [83] qui décrit plus particulièrement les méthodes PIMC (Path Integral Quantum Monte Carlo).

Appendice V

Multiplicateurs de Lagrange

1	Fonction de deux variables	717
2	Fonction de N variables	719

La méthode des multiplicateurs de Lagrange permet de trouver les extremums (maximums ou minimums) d'une fonction F lorsque les variables dont elle dépend sont reliées par des contraintes, au lieu d'être indépendantes. Cet appendice propose un résumé de la méthode. La première partie est consacrée aux fonctions de deux variables, la seconde à la généralisation à un nombre quelconque de variables.

1. Fonction de deux variables

Considérons une fonction réelle $F(x_1, x_2)$ de deux variables indépendantes x_1 et x_2 . La fonction F est supposée régulière, continue, dérivable, et à dérivées continues. Les extremums de F sont obtenus pour les valeurs des variables qui annulent les deux dérivées partielles :

$$\frac{\partial F(x_1, x_2)}{\partial x_1} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial F(x_1, x_2)}{\partial x_2} = 0 \quad (1)$$

qu'on peut résumer comme l'annulation du gradient de F :

$$\overrightarrow{\nabla F} = 0 \quad (2)$$

Deux équations à deux inconnues x_1 et x_2 permettent en général d'obtenir un nombre fini de solutions (couples de valeurs de x_1 et x_2) ; ce nombre peut d'ailleurs être nul si la fonction F ne possède pas d'extremum.

Recherchons maintenant les extremums de F lorsque les variables ne sont plus indépendantes, mais liées par une condition :

$$E(x_1, x_2) = C \quad (3)$$

où C est une constante et $E(x_1, x_2)$ une fonction régulière (continue, dérivable, etc.). Lorsque cette condition est satisfaite, le point M de coordonnées x_1 et x_2 est alors astreint à se déplacer sur une courbe dans le plan (en trait plein sur la Figure 1). Plaçons-nous au voisinage d'un point M_0 quelconque de la courbe, et déplaçons le point M en donnant aux coordonnées des accroissements dx_1 et dx_2 . Comme E doit rester constant, dx_1 et dx_2 sont nécessairement reliés par :

$$dE = \frac{\partial E(x_1, x_2)}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial E(x_1, x_2)}{\partial x_2} dx_2 = \overrightarrow{\nabla E} \cdot \overrightarrow{dM} = 0 \quad (4)$$

Le déplacement du point ne peut donc se faire que selon la tangente à la courbe, c'est-à-dire perpendiculairement au gradient de la fonction E , comme illustré sur la Figure 1. Quant à la variation de F , elle est donnée par :

$$dF = \overrightarrow{\nabla F} \cdot \overrightarrow{dM} \quad (5)$$

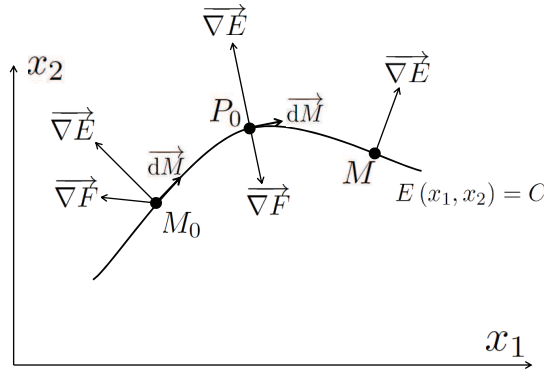


FIGURE 1 – Lorsque la contrainte $E(x_1, x_2) = C$ est satisfaite, le point M de coordonnées x_1 et x_2 ne peut se déplacer que sur une courbe du plan, représentée par un trait plein. La tangente à cette courbe est perpendiculaire au gradient $\vec{\nabla}E$ de la fonction E , de sorte que le déplacement doit se faire perpendiculairement à ce gradient. Lorsque le déplacement se fait à partir d'un point quelconque M_0 , les vecteurs $\vec{\nabla}E$ et $\vec{\nabla}F$ ne sont pas parallèles, et la fonction F varie donc au premier ordre en $dF = \vec{\nabla}F \cdot d\vec{M}$. Cependant, si la variation se fait à partir d'un point où, comme au point P_0 , les deux gradients sont parallèles, la fonction F est stationnaire. Géométriquement, ce parallélisme signifie que la courbe en traits pleins est tangente à la courbe de niveau de la surface représentant la fonction $F(x_1, x_2)$.

En général, les vecteurs $\vec{\nabla}E$ et $\vec{\nabla}F$ ne sont pas parallèles, de sorte que ce produit scalaire n'est pas nul. La fonction F varie alors au premier ordre en $d\vec{M}$; elle n'est donc pas stationnaire en ce point.

Toutefois, si nous nous plaçons au voisinage d'un point P_0 de la courbe où les deux gradients sont parallèles, la condition (4) entraîne immédiatement la nullité de la variation (5), et la stationnarité est obtenue. Dans un tel cas, la courbe selon laquelle se déplace M (à E constant) est tangente en P_0 à la courbe de niveau de la surface qui représente la fonction F . Géométriquement, on comprend ainsi qu'un déplacement le long d'une ligne de niveau ne fasse pas varier F au premier ordre. Algébriquement, écrire que les gradients sont parallèles consiste à écrire qu'il existe une constante λ , dite "multiplicateur de Lagrange", telle que :

$$\vec{\nabla}F = \lambda \vec{\nabla}E \tag{6}$$

ce qui revient à dire que la différentielle de la fonction $F - \lambda E$ est nulle :

$$\begin{aligned} d(F - \lambda E) &= \overrightarrow{\nabla}(F - \lambda E) \cdot d\overrightarrow{M} \\ &= \frac{\partial [F - \lambda E]}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial [F - \lambda E]}{\partial x_2} dx_2 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

Il suffit donc de remplacer la fonction F par la fonction $F - \lambda E$ avec un multiplicateur de Lagrange λ quelconque pour obtenir la stationnarité de F en présence de la contrainte (3) sur les variables.

Lorsque λ est donné, on obtient à nouveau deux équations à deux inconnues, de sorte que les variables x_1 et x_2 sont déterminées. Leur report dans (3) fournit alors une valeur de C , qui n'est donc pas libre. Mais, si l'on fait varier le multiplicateur de Lagrange λ , la constante C devient une fonction de λ , et peut donc être ajustée en changeant λ . Dans l'équilibre canonique par exemple (Appendice VI, § 1.b), on maximise la valeur de l'entropie S (qui joue alors le rôle de la fonction F) à valeur moyenne E de l'énergie constante. On introduit alors un multiplicateur de Lagrange β pour rendre stationnaire $S - \beta E$; varier β permet de contrôler la valeur de E .

2. Fonction de N variables

Considérons maintenant une fonction $F(x_1, x_2, \dots, x_N)$ de N variables indépendantes x_1, x_2, \dots, x_N . Les extremums de F sont obtenus en annulant les N composantes du gradient de F (chaque composante est la dérivée partielle de F par rapport à l'une des variables) :

$$\overrightarrow{\nabla} F = 0 \quad (8)$$

On obtient ainsi N équations pour déterminer N inconnues, donc un nombre fini d'extremums.

Supposons maintenant que les N variables soient liées par $P \leq N$ conditions :

$$E_p(x_1, x_2, \dots, x_N) = C_p \quad \text{avec } p = 1, 2, \dots, P \quad (9)$$

Considérons un point M dans l'espace à N dimensions de coordonnées x_1, x_2, \dots, x_N . Si ces coordonnées satisfont les P conditions (9), leurs variations infinitésimales obéissent aux P relations :

$$\overrightarrow{\nabla} E_p \cdot d\overrightarrow{M} = 0 \quad \text{avec } p = 1, 2, \dots, P \quad (10)$$

Pour que toutes les fonctions E_p restent constantes il faut donc que, dans l'espace à N dimensions, la variation $d\overrightarrow{M}$ de la position du point M soit orthogonale à tous les gradients $\overrightarrow{\nabla} E_p$. Deux cas sont alors possibles :

(i) soit le gradient $\overrightarrow{\nabla} F$ est contenu dans le sous-espace engendré par les $\overrightarrow{\nabla} E_p$, cas auquel la condition d'orthogonalité (10) implique que $d\overrightarrow{M}$ est également orthogonal à $\overrightarrow{\nabla} F$, ce qui entraîne la nullité de la variation $dF = \overrightarrow{\nabla} F \cdot d\overrightarrow{M}$; la stationnarité est alors assurée ;

(ii) soit le gradient $\overrightarrow{\nabla} F$ n'est pas contenu dans ce sous-espace, et il possède donc une composante non nulle $\overrightarrow{\nabla} F_{\perp}$ orthogonale à ce sous-espace. On peut alors

choisir \overrightarrow{dM} parallèle à $\overrightarrow{\nabla F}_\perp$ et obtenir une variation du premier ordre de F , tout en satisfaisant aux P contraintes.

La conclusion est donc que la stationnarité de F est équivalente à la condition que le gradient $\overrightarrow{\nabla F}$ soit contenu dans le sous-espace engendré par les $\overrightarrow{\nabla E}_p$, c'est-à-dire à la condition qu'il existe des multiplicateurs de Lagrange λ_p (avec $p = 1, 2, \dots, P$) tels que :

$$\overrightarrow{\nabla F} = \lambda_1 \overrightarrow{\nabla E}_1 + \lambda_2 \overrightarrow{\nabla E}_2 + \dots + \lambda_P \overrightarrow{\nabla E}_P \quad (11)$$

De façon équivalente, la condition de stationnarité peut être obtenue en écrivant la nullité de la différentielle :

$$d(F - \lambda_1 E_1 - \lambda_2 E_2 - \dots - \lambda_P E_P) = 0 \quad (12)$$

et en traitant les variables x_1, x_2, \dots, x_N comme si elles étaient indépendantes.

Si les multiplicateurs de Lagrange λ_p sont donnés, chaque composante de la relation (11) fournit une équation, de sorte qu'on a autant d'équations que de variables x_1, x_2, \dots, x_N . On obtient alors pour la fonction F un nombre fini de points d'extremums liés par les contraintes, avec des valeurs déterminées des fonctions E_1, E_2, \dots, E_P . Si l'on fait varier les multiplicateurs de Lagrange, on fait également varier les valeurs de ces fonctions.

Appendice VI

Rappels de mécanique statistique quantique

1	Ensembles statistiques	721
1-a	Ensemble micro-canonique	721
1-b	Ensemble canonique	725
1-c	Ensemble grand-canonique	727
2	Variables intensives ou extensives; valeur des gran-	
	deurs physiques	729
2-a	Micro-canonique	730
2-b	Canonique	730
2-c	Grand-canonique	731
2-d	Autres ensembles	732

En mécanique quantique comme en mécanique classique, lorsque l'on étudie un système à un très grand nombre de degrés de liberté (par exemple un ensemble d'un très grand nombre de particules, de l'ordre du nombre d'Avogadro), il n'est pas possible d'utiliser une description du système avec une précision maximale; on doit recourir à une description moins détaillée, de caractère seulement statistique. Le but de cet appendice n'est pas de fournir une introduction générale à la mécanique statistique, ni aux postulats sur lesquels elle repose. Il est simplement de résumer un certain nombre de résultats de mécanique statistique quantique dont il est fait usage dans plusieurs compléments. En particulier, la majorité des compléments du Chapitre XV, ainsi que les B_{XVII} et D_{XVII} font usage de la notion de potentiel chimique μ ou du "grand potentiel" Φ ; nous verrons dans cet Appendice comment les interpréter dans le cadre des différents ensembles statistiques.

1. Ensembles statistiques

Plusieurs "ensembles statistiques" sont couramment utilisés pour décrire les systèmes physiques à l'équilibre. Nous introduisons ici les trois plus courants : l'ensemble micro-canonique, l'ensemble canonique, et l'ensemble grand-canonique. Le premier de ces ensembles fournit un cadre général permettant une introduction naturelle des deux autres.

1-a. Ensemble micro-canonique

On considère un système physique de N particules contenues dans une boîte de volume \mathcal{V} . L'énergie E du système tombe dans un certain intervalle :

$$E - \Delta E/2 \leq E \leq E + \Delta E/2 \tag{1}$$

avec $\Delta E \ll E$. Ce système est isolé de l'extérieur, avec lequel il ne peut échanger ni particule ni énergie. On note $|E, q\rangle$ les états propres de son hamiltonien \hat{H} , où q est un indice permettant de tenir compte de la dégénérescence de chaque valeur propre E de cet hamiltonien.

$\alpha.$ Opérateur densité, entropie

On suppose que le système a la même probabilité de se trouver dans l'un quelconque des états dont l'énergie tombe dans l'intervalle (1); aucun état n'est donc privilégié par rapport à tous les autres. L'opérateur densité micro-canonique du système à l'équilibre est alors :

$$\rho_{\text{eq}} = \frac{1}{Z} P_{\Delta E}(E) \quad (2)$$

où $P_{\Delta E}(E)$ est le projecteur sur le sous-espace engendré par l'ensemble des états concernés :

$$P_{\Delta E}(E) = \sum_{E'=E-\frac{\Delta E}{2}}^{E+\frac{\Delta E}{2}} \sum_q |E', q\rangle \langle E', q| \quad (3)$$

et où Z est la fonction de partition micro-canonique définie par :

$$Z = \text{Tr} \{P_{\Delta E}(E)\} \quad (4)$$

La relation (2) exprime que les probabilités d'occupation des états $|E, q\rangle$ sont toutes égales à $1/Z$. Comme, dans (3), chacun des projecteurs sur un état $|E, n\rangle$ contribue d'une unité à la trace de (4), la fonction de partition Z n'est autre que le nombre de termes dans la somme (3), soit le nombre de niveaux dans l'intervalle d'énergie (1). Si $D(E)$ est la densité d'états, on a donc :

$$Z = D(E) \times \Delta E \quad (5)$$

Comme dans le § 1 du Complément A_{XXI}, nous définissons alors l'entropie S par (k_B est la constante de Boltzmann) :

$$S = -k_B \text{Tr} \{\rho \text{Log} \rho\} \quad (6)$$

Comme les $|E, n\rangle$ sont vecteurs propres de ρ_{eq} de valeurs propres $1/Z$, nous avons :

$$\text{Log} \rho_{\text{eq}} = -\text{Log} Z \sum_{E'=E-\frac{\Delta E}{2}}^{E+\frac{\Delta E}{2}} \sum_q |E', q\rangle \langle E', q| \quad (7)$$

de sorte que :

$$\rho_{\text{eq}} \text{Log} \rho_{\text{eq}} = -\frac{\text{Log} Z}{Z} \sum_{E'=E-\frac{\Delta E}{2}}^{E+\frac{\Delta E}{2}} \sum_q |E', q\rangle \langle E', q| \quad (8)$$

Nous reconnaissons au second membre le projecteur $P_{\Delta E}(E)$ dont la trace est Z , de sorte que :

$$\text{Tr} \{\rho_{\text{eq}} \text{Log} \rho_{\text{eq}}\} = -\text{Log} Z \quad (9)$$

La valeur à l'équilibre de l'entropie est donc :

$$S = k_B \text{Log} Z \quad (10)$$

$\beta.$ *Température, potentiel chimique*

Supposons maintenant que l'on varie de dE l'énergie E d'équilibre, à volume \mathcal{V} et nombre de particules N constant. Comme aucun travail n'est échangé avec l'extérieur (les parois sont fixes), cette variation est intégralement une quantité de chaleur :

$$dQ = dE = TdS \tag{11}$$

où la seconde égalité résulte de la définition thermodynamique usuelle de la variation d'entropie $dS=dQ/T$. Ainsi, dans l'ensemble micro-canonique, la température est définie par :

$$\frac{1}{T} = \left. \frac{\partial S}{\partial E} \right|_{N,\mathcal{V}} \tag{12}$$

où nous avons utilisé la notation des dérivées partielles pour insister sur le fait que les variations sont effectuées à N et \mathcal{V} constants.

De même, faisons varier le nombre de particules N à volume et énergie E constants. On définit alors le "potentiel chimique" μ (homogène à une énergie) comme :

$$\mu = -T \left. \frac{\partial S}{\partial N} \right|_{E,\mathcal{V}} \tag{13}$$

A température constante, μ est donc d'autant plus grand en valeur absolue que l'entropie (nombre de niveaux accessibles dans la bande d'énergie ΔE) varie rapidement avec le nombre de particules N . Nous verrons que le potentiel chimique joue un rôle essentiel dans l'équilibre grand-canonique (§ 1-c). La troisième dérivée partielle de S (celle par rapport au volume) sera évaluée au § 2-a.

Remarque :

Reportons (5) dans la relation (10), en multipliant $D(E)$ par $k_B T$ et en divisant ΔE par cette même quantité (ceci permet de conserver des arguments sans dimension dans les logarithmes) ; il vient :

$$\frac{S}{k_B} = \text{Log} [D(E) k_B T] + \text{Log} \left[\frac{\Delta E}{k_B T} \right] \tag{14}$$

Pour un système physique macroscopique, le nombre de particules est très élevé, de l'ordre du nombre d'Avogadro. Examinons donc ce qui se produit lorsque le nombre de particules N tend vers l'infini ; nous supposons que l'énergie E ainsi que le volume varient proportionnellement à N (limite thermodynamique). On s'attend alors à ce que l'entropie croisse elle aussi de façon proportionnelle à N . Cette variation linéaire de l'entropie ne peut pas provenir du second terme de (14) : même si l'intervalle d'énergie ΔE varie proportionnellement à N , il n'introduit qu'une variation logarithmique beaucoup plus lente. L'essentiel de la variation de S provient donc du premier terme de (14), et du fait que la densité d'états croît extrêmement vite avec N : la variation de $D(E)$ est de type exponentiel et, comme son exposant contient N , elle est fantastiquement rapide. A la limite des grands systèmes, c'est donc le premier terme de (14) qui domine très largement le second. C'est pourquoi l'on dit

souvent que l'entropie caractérise la densité d'états d'un système physique (plus précisément, le nombre de ses niveaux quantiques d'énergie dans un intervalle d'énergie microscopique, ici choisi égal à $k_B T$).

γ . *Maximisation de l'entropie*

Prenons maintenant pour ρ un opérateur densité quelconque, hermitique, de valeurs propres positives ou nulles dont la somme est égale à l'unité. Appelons $|\theta_n\rangle$ ses vecteurs propres et p_n ses valeurs propres ($0 \leq p_n \leq 1$) ; ces dernières satisfont la relation de somme :

$$\sum_n p_n = 1 \tag{15}$$

Nous supposons que ρ est restreint à la bande d'énergie (1) : tous les $|\theta_n\rangle$ pour lesquels $p_n \neq 0$ sont des combinaisons linéaires quelconques des vecteurs propres $|E, q\rangle$ satisfaisant (1).

On peut attribuer à ρ une entropie :

$$S_\rho = -k_B \text{Tr} \{ \rho \text{Log} \rho \} \tag{16}$$

où k_B est la constante de Boltzmann. Nous allons voir que, parmi tous les opérateurs ρ possibles, celui qui maximise cette entropie est l'opérateur d'équilibre ρ_{eq} . Nous pouvons en effet écrire :

$$\rho = \sum_n p_n |\theta_n\rangle \langle \theta_n| \qquad \text{Log} \rho = \sum_n \text{Log} p_n |\theta_n\rangle \langle \theta_n| \tag{17}$$

et donc :

$$S_\rho = -k_B \text{Tr} \left\{ \sum_n p_n \text{Log} p_n |\theta_n\rangle \langle \theta_n| \right\} = -k_B \sum_n p_n \text{Log} p_n \tag{18}$$

Si les p_n varient, la variation de S s'écrit :

$$dS = -k_B \sum_n [1 + \text{Log} p_n] dp_n \tag{19}$$

Mais la relation (15) impose que la somme des variations dp_n doit rester nulle. Ecrivons maintenant que (19) est nulle quand cette contrainte est satisfaite. Nous utilisons pour cela un multiplicateur de Lagrange λ (Appendice V) qui nous permet d'obtenir la relation :

$$\sum_n [\lambda + 1 + \text{Log} p_n] dp_n = 0 \tag{20}$$

qui doit être vérifiée pour toute variation dp_n . L'annulation des coefficients conduit alors à :

$$\text{Log} p_n = -\lambda - 1 \tag{21}$$

qui indique que tous les p_n non nuls sont égaux. L'opérateur ρ est alors proportionnel au projecteur (3). Lorsqu'on normalise sa trace à 1, on obtient (2) : l'opérateur

densité micro-canonique correspond donc à un extremum de l'entropie. Comme les p_n sont tous compris entre 0 et 1, la relation (18) montre que cet extremum est positif. Pour savoir s'il s'agit d'un maximum ou d'un minimum, choisissons maintenant un autre opérateur ρ dont toutes les valeurs propres sont nulles, sauf une qui vaut 1 ; il conduit à une entropie S_ρ nulle. L'extremum obtenu à l'équilibre micro-canonique est donc un maximum absolu de S_ρ .

Ce résultat constitue un théorème important : l'opérateur densité qui maximise l'entropie est la somme des projecteurs sur tous les états accessibles, avec des valeurs propres égales (probabilités de trouver le système physique dans chacun de ces états).

1-b. Ensemble canonique

Nous considérons maintenant un système physique \mathcal{S} qui n'est plus isolé, mais couplé à un réservoir \mathcal{R} avec lequel il échange de l'énergie ; \mathcal{S} et \mathcal{R} sont par exemple couplés à travers une paroi qui conduit la chaleur, mais qui reste fixe de sorte qu'aucun travail ne peut être échangé entre eux. Nous appelons $N_{\mathcal{R}}$, $E_{\mathcal{R}}$ et $\mathcal{V}_{\mathcal{R}}$ le nombre de particules, l'énergie et le volume du réservoir \mathcal{R} .

α. Opérateur densité

Nous supposons que le réservoir \mathcal{R} est beaucoup plus grand que le système \mathcal{S} , de sorte que sa température ne varie pas lorsqu'il échange de l'énergie avec \mathcal{S} . Selon la relation (12), cela signifie que sa température $T_{\mathcal{R}}$ définie par :

$$\frac{1}{T_{\mathcal{R}}} = \left. \frac{\partial S_{\mathcal{R}}}{\partial E_{\mathcal{R}}} \right|_{N_{\mathcal{R}}, \mathcal{V}_{\mathcal{R}}} \quad (22)$$

est une constante. Pour la caractériser, nous introduisons la constante β :

$$\beta = \frac{1}{k_B T_{\mathcal{R}}} = \frac{1}{k_B} \left. \frac{\partial S_{\mathcal{R}}}{\partial E_{\mathcal{R}}} \right|_{N_{\mathcal{R}}, \mathcal{V}_{\mathcal{R}}} \quad (23)$$

Or nous avons vu en (10) que $S_{\mathcal{R}} = k_B \text{Log} Z_{\mathcal{R}}$, où $Z_{\mathcal{R}}$ est le nombre de niveaux accessibles au réservoir dans une bande d'énergie ΔE centrée autour de $E_{\mathcal{R}}$. Nous avons donc :

$$\left. \frac{\partial \text{Log} Z_{\mathcal{R}}}{\partial E_{\mathcal{R}}} \right|_{N_{\mathcal{R}}, \mathcal{V}_{\mathcal{R}}} = \beta \quad (24)$$

de sorte que les variations en fonction de l'énergie (mais à $N_{\mathcal{R}}$ et $\mathcal{V}_{\mathcal{R}}$ constants) de ce nombre de niveaux sont exponentielles :

$$Z_{\mathcal{R}} \propto e^{\beta E_{\mathcal{R}}} \quad (25)$$

Le système total $\mathcal{S} + \mathcal{R}$ est décrit par un opérateur densité à l'équilibre micro-canonique. Ses vecteurs propres de l'énergie sont les produits tensoriels des vecteurs propres $|E, q\rangle$ de l'énergie du système \mathcal{S} par les vecteurs propres $|E_{\mathcal{R}}, q_{\mathcal{R}}\rangle$ de l'énergie du système \mathcal{R} :

$$|E, q\rangle \otimes |E_{\mathcal{R}}, q_{\mathcal{R}}\rangle \quad (26)$$

L'opérateur densité micro-canonique de $\mathcal{S} + \mathcal{R}$ d'énergie totale $E_{\text{tot}} = E + E_{\mathcal{R}}$ est alors :

$$\rho_{\mathcal{S}+\mathcal{R}} = \frac{1}{Z_{\mathcal{S}+\mathcal{R}}} \sum_{E'+E'_{\mathcal{R}}=E_{\text{tot}}-\frac{\Delta E}{2}}^{E_{\text{tot}}+\frac{\Delta E}{2}} \sum_q (|E', q\rangle \otimes |E'_{\mathcal{R}}, q_{\mathcal{R}}\rangle) (\langle E', q| \otimes \langle E'_{\mathcal{R}}, q_{\mathcal{R}}|) \quad (27)$$

L'opérateur densité ρ_{eq} du système \mathcal{S} est obtenu par une trace sur le réservoir :

$$\rho_{\text{eq}} = \text{Tr}_{\mathcal{R}} \{ \rho_{\mathcal{S}+\mathcal{R}} \} \quad (28)$$

Dans (27), la trace sur \mathcal{R} de chaque projecteur $|E'_{\mathcal{R}}, q_{\mathcal{R}}\rangle \langle E'_{\mathcal{R}}, q_{\mathcal{R}}|$ donne simplement l'unité. Donc ρ_{eq} est simplement une somme de projecteurs sur les états propres de l'énergie $|E', q\rangle \langle E', q|$, multipliés par le nombre de niveaux de \mathcal{R} d'énergie $E_{\text{tot}} - E'$ dans une bande d'énergie ΔE . Or la relation (25) indique que ce nombre de niveaux varie comme l'exponentielle $e^{\beta E_{\mathcal{R}}} = e^{\beta(E_{\text{tot}} - E')}$. Si nous supprimons les facteurs de proportionnalité $1/Z_{\mathcal{S}+\mathcal{R}}$ et $e^{\beta E_{\text{tot}}}$, nous obtenons donc :

$$\rho_{\text{eq}} \propto \sum_{E'} \sum_q e^{-\beta E'} |E', q\rangle \langle E', q| = e^{-\beta \hat{H}} \quad (29)$$

où \hat{H} est l'hamiltonien du système \mathcal{S} . La normalisation de la trace de ρ conduit alors à :

$$\rho_{\text{eq}} = \frac{1}{Z_c} e^{-\beta \hat{H}} \quad (30)$$

où Z_c est la "fonction de partition canonique" définie par :

$$Z_c = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \right\} \quad (31)$$

Ces deux relations fournissent donc l'opérateur densité de \mathcal{S} à l'équilibre thermique canonique. Contrairement à ce qui se produisait avec l'équilibre micro-canonique, l'énergie du système \mathcal{S} n'est plus restreinte à un petit intervalle; elle peut fluctuer spontanément, au lieu d'être restreinte à une bande d'énergie donnée ΔE .

Le potentiel thermodynamique de l'équilibre canonique est défini par une fonction F appelée "énergie libre" :

$$F = \langle \hat{H} \rangle - TS \quad (32)$$

A l'équilibre où ρ est donné par (30), cette énergie libre vaut donc :

$$F = \langle \hat{H} \rangle + k_B T \text{Tr} \left\{ \rho_{\text{eq}} \left[-\text{Log} Z_c - \beta \hat{H} \right] \right\} = \langle \hat{H} \rangle - \langle \hat{H} \rangle - k_B T \text{Log} Z_c \quad (33)$$

de sorte que nous obtenons :

$$F = -k_B T \text{Log} Z_c \quad (34)$$

β . *Minimisation de l'énergie libre*

Supposons maintenant que ρ soit un opérateur densité quelconque, et montrons que l'énergie libre associée est minimale lorsque ρ prend la valeur de l'équilibre canonique (30). Calculons en effet la variation de F :

$$dF = \text{Tr} \left\{ \left[\hat{H} + k_B T (1 + \text{Log} \rho) \right] d\rho \right\} \quad (35)$$

Cette variation ne peut s'annuler pour toute variation $d\rho$ que si l'opérateur entre crochets sous la trace s'annule, donc si :

$$\text{Log} \rho = -1 - \beta \hat{H} \quad (36)$$

qui indique que $\rho \propto e^{-\beta \hat{H}}$; on retrouve donc l'opérateur d'équilibre canonique. D'autre part, il suffit de supposer que ρ est le projecteur sur un état de grande énergie positive pour que S soit nul et $\langle \hat{H} \rangle$ arbitrairement grand, et pour que F ait une valeur élevée ; il est donc clair que l'extremum de F lorsque ρ prend la valeur d'équilibre est un minimum.

1-c. Ensemble grand-canonique

Nous supposons maintenant que le système physique \mathcal{S} peut échanger avec le réservoir, non seulement de l'énergie, mais aussi des particules ; ils sont maintenant couplés par une interface qui laisse également passer les particules. Comme plus haut, ce réservoir est supposé suffisamment grand pour que sa température reste constante lorsqu'il échange de l'énergie. Il est également supposé suffisamment grand pour que son nombre de particules change très peu en valeur relative lors de ses échanges avec \mathcal{S} ; il en découle que son potentiel chimique reste lui aussi constant lorsqu'il échange des particules :

$$\mu = -T \left. \frac{\partial S_{\mathcal{R}}}{\partial N} \right|_{E, \mathcal{V}} = \text{constante} \quad (37)$$

α . *Opérateur densité*

Comme le nombre de particules N du système \mathcal{S} et celui $N_{\mathcal{R}}$ du réservoir sont maintenant variables, leurs espaces des états sont maintenant des espaces de Fock (Chapitre XV). Il faut donc ajouter des indices N et $N_{\mathcal{R}}$ respectivement aux kets $|E, q\rangle$ et $|E_{\mathcal{R}}, q_{\mathcal{R}}\rangle$, et donc deux sommations sur ces indices à l'expression de l'opérateur densité micro-canonique $\rho_{\mathcal{S}+\mathcal{R}}$ écrit en (27). L'opérateur densité micro-canonique du système total devient alors :

$$\begin{aligned} \rho_{\mathcal{S}+\mathcal{R}} = & \frac{1}{Z_{\mathcal{S}+\mathcal{R}}} \sum_{E'+E'_{\mathcal{R}}=E_{\text{tot}}-\frac{\Delta E}{2}}^{E_{\text{tot}}+\frac{\Delta E}{2}} \sum_{N'+N'_{\mathcal{R}}=N_{\text{tot}}} \\ & \sum_q \left(|E', N', q\rangle \otimes |E'_{\mathcal{R}}, N'_{\mathcal{R}}, q_{\mathcal{R}}\rangle \right) \left(\langle E', N', q| \otimes \langle E'_{\mathcal{R}}, N'_{\mathcal{R}}, q_{\mathcal{R}}| \right) \end{aligned} \quad (38)$$

où E_{tot} et N_{tot} sont respectivement l'énergie et le nombre de particules du système total $\mathcal{S} + \mathcal{R}$. La suite du raisonnement se déroule comme au § 1-b- α . Une trace

partielle sur le réservoir fournit l'opérateur densité de S , qui est une combinaison linéaire de projecteurs :

$$|E', N', q\rangle \langle E', N', q| \quad (39)$$

avec des poids qui correspondent au nombre d'états du réservoir dans une bande d'énergie centrée en $E'_{\mathcal{R}} = E_{\text{tot}} - E'$ lorsque le nombre de particules du réservoir est $N'_{\mathcal{R}} = N_{\text{tot}} - N'$. Deux variables du réservoir varient donc simultanément, au lieu d'une seule pour l'équilibre canonique. Mais le fait que μ et β restent constants dans les relations (24) et (37) implique que l'entropie $S_{\mathcal{R}}$ varie linéairement en fonction de ces variables :

$$S_{\mathcal{R}} = S_{\mathcal{R}}^0 + \frac{1}{T} E'_{\mathcal{R}} - \frac{\mu}{T} N'_{\mathcal{R}} = S_{\mathcal{R}}^0 + k_B \beta (E'_{\mathcal{R}} - \mu N'_{\mathcal{R}}) \quad (40)$$

où $S_{\mathcal{R}}^0$ est une constante qui ne joue aucun rôle dans la suite. Si nous utilisons à nouveau la relation (10) pour relier l'entropie du réservoir au nombre d'états $Z_{\mathcal{R}}$ accessibles au réservoir, nous obtenons :

$$Z_{\mathcal{R}} = e^{S/k_B} \propto e^{\beta(E'_{\mathcal{R}} - \mu N'_{\mathcal{R}})} = e^{\beta(E_{\text{tot}} - \mu N_{\text{tot}})} \times e^{-\beta(E' - \mu N')} \quad (41)$$

où μ et β restent constants. Le même raisonnement que plus haut montre alors que la trace sur les variables du réservoir conduit à l'opérateur densité ρ suivant pour le système \mathcal{S} :

$$\rho_{\text{eq}} = \frac{1}{Z_{gc}} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \quad (42)$$

avec :

$$Z_{gc} = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \right\} \quad (43)$$

où \hat{N} est l'opérateur nombre total de particules de \mathcal{S} (les lettres gc sont l'abréviation de "grand canonique").

β . *Grand-potentiel*

Le potentiel thermodynamique de l'ensemble grand-canonique est le "grand potentiel" Φ défini par :

$$\Phi = \langle H \rangle - TS - \mu \langle N \rangle \quad (44)$$

Une démonstration calquée sur celle que nous avons faite pour F dans le cadre de l'ensemble canonique montre que la valeur à l'équilibre de ce potentiel est :

$$\Phi = -k_B T \text{Log} Z_{gc} \quad (45)$$

Enfin, si l'on fait varier ρ , on voit pour les mêmes raisons que plus haut que ce potentiel atteint un minimum lorsque ρ est donné par (42); une démonstration détaillée de cette propriété est donnée au § 1 du Complément E_{XV}.

2. Variables intensives ou extensives ; valeur des grandeurs physiques

Considérons un système physique macroscopique à l'équilibre \mathcal{S} , et divisons-le en deux sous-systèmes de tailles égales \mathcal{S}' et \mathcal{S}'' ; on peut pour cela insérer par l'esprit une paroi qui sépare \mathcal{S}' de \mathcal{S}'' . Certaines grandeurs physiques associées à \mathcal{S}' ou \mathcal{S}'' , pris séparément, sont la moitié de celles de \mathcal{S} : les volumes, les énergies, les nombres de particules, les entropies, etc. De telles grandeurs physiques sont dites "extensives". En revanche, certaines autres grandeurs physiques ne changent pas lors de cette division : le nombre de particules par unité de volume, la température, le potentiel chimique, etc. De telles grandeurs physiques sont dites "intensives". De façon générale, lorsqu'un système physique macroscopique de volume \mathcal{V} est divisé en plusieurs parties macroscopiques de volumes respectifs $\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2, \dots$, les grandeurs physiques attachées à chacun d'entre eux qui sont proportionnelles à leur volume sont dites extensives, celles qui restent invariantes sont dite intensives.

En ce qui concerne les ensembles décrits plus haut, leur description est faite par une combinaison¹ de variables extensives et intensives :

(i) Dans l'ensemble micro-canonique, les trois variables indépendantes qui décrivent l'équilibre du système physique sont les trois variables extensives \mathcal{V} , N et son énergie E ; les autres grandeurs physiques (température, entropie, potentiel chimique, etc.) sont considérées comme des fonctions de ces variables. Le potentiel thermodynamique est l'entropie S , extensive et directement reliée au logarithme de la fonction de partition micro-canonique.

(ii) Dans l'ensemble canonique, les trois variables indépendantes comprennent deux variables extensives \mathcal{V} et N ainsi qu'une variable intensive T (ou β). Le potentiel thermodynamique est l'énergie libre F , fonction extensive directement reliée au logarithme de la fonction de partition canonique.

(iii) Dans l'ensemble grand-canonique, il existe une seule variable indépendante extensive, le volume \mathcal{V} , et deux variables intensives T et μ . Le potentiel thermodynamique est la fonction Φ , extensive et directement liée au logarithme de la fonction de partition grand-canonique.

Pour un système macroscopique, on considère en général que les trois ensembles ci-dessus sont équivalents. Les descriptions statistiques sont cependant différentes : dans l'équilibre canonique par exemple, l'énergie n'est pas contrainte à demeurer strictement dans un intervalle ΔE , mais peut fluctuer et, en théorie, prendre des valeurs hors de cet intervalle. Cependant, si le système est macroscopique, les fluctuations de l'énergie autour de sa valeur moyenne restent très petites en valeur relative ; on commet une erreur très faible en supposant que l'énergie ne sort pas d'une bande fixe ΔE . Ceci permet d'identifier $\langle H \rangle$ à l'énergie micro-canonique E :

$$\langle H \rangle = E \quad (46)$$

De même, dans l'ensemble grand-canonique, le nombre de particules fluctue autour de sa valeur moyenne $\langle N \rangle$ mais, pour un système physique macroscopique, ces fluctuations restent en général² très petites en valeur relative. On peut donc identifier

1. Tout ensemble doit être décrit par au moins une variable extensive, sinon la taille du système ne serait pas définie.

2. Il existe cependant des exceptions à cette règle : par exemple, pour un gaz parfait de Bose condensé, les fluctuations grand-canoniques du nombre de particules restent grandes pour un système macroscopique. C'est un système très particulier où les ensembles canonique et grand-canonique ne sont pas équivalents pour certaines propriétés physiques.

cette valeur moyenne au nombre de particules N des ensembles micro-canonique et canonique :

$$\langle N \rangle = N \tag{47}$$

2-a. Micro-canonique

Les relations (12) et (13) fournissent les dérivées partielles de l'entropie S par rapport aux variables E et N ; recherchons maintenant celle par rapport au volume \mathcal{V} .

Supposons donc que le volume \mathcal{V} du système physique varie d'une quantité $d\mathcal{V}$, à nombre de particules N constant et sans échange de chaleur (nous supposons que les parois du système sont isolantes). Si P est la pression interne du système, il fournit alors à l'extérieur un travail $Pd\mathcal{V}$, ce qui veut dire que son énergie interne varie de la quantité :

$$dE = -Pd\mathcal{V} \tag{48}$$

En l'absence d'échange de chaleur, $dQ = 0$, et la relation thermodynamique $dQ = TdS$ entraîne la nullité de la variation de l'entropie :

$$dS = \left. \frac{\partial S}{\partial \mathcal{V}} \right|_{N,E} d\mathcal{V} + \left. \frac{\partial S}{\partial E} \right|_{N,E} dE = 0 \tag{49}$$

Insérons la relation (12) dans ce résultat et multiplions par T ; nous obtenons :

$$T \left. \frac{\partial S}{\partial \mathcal{V}} \right|_{N,E} d\mathcal{V} + dE = 0 \tag{50}$$

Or la relation (48) montre que la pression P est donnée par $-dE/d\mathcal{V}$; compte tenu de (10), nous obtenons donc :

$$P = T \left. \frac{\partial S}{\partial \mathcal{V}} \right|_{N,E} = k_B T \left. \frac{\partial \text{Log} Z}{\partial \mathcal{V}} \right|_{N,E} \tag{51}$$

Nous obtenons ainsi la pression dans le cadre de l'ensemble micro-canonique.

Dans le § 1-a- β , nous avons déjà étudié les effets sur l'entropie des variations de E (à \mathcal{V} et N constants) et de N (à E et \mathcal{V} constants). Le présent calcul complète donc celui des trois dérivées partielles du potentiel thermodynamique micro-canonique S , de sorte que nous pouvons écrire sa différentielle totale sous la forme :

$$\boxed{dS = \frac{1}{T}dE + \frac{P}{T}d\mathcal{V} - \frac{\mu}{T}dN} \tag{52}$$

2-b. Canonique

Pour un système macroscopique, nous avons vu plus haut qu'on peut remplacer $\langle H \rangle$ par l'énergie micro-canonique E dans la définition (32) de l'énergie libre. La relation (32) conduit alors par différenciation à :

$$dF = dE - TdS - SdT \tag{53}$$

Reportons alors (52) dans le terme en TdS de cette relation ; les termes en dE disparaissent, et il vient :

$$\boxed{dF = -SdT - Pd\mathcal{V} + \mu dN} \quad (54)$$

qui fournit la différentielle totale du potentiel thermodynamique de l'ensemble canonique.

Cette relation permet d'interpréter physiquement le potentiel chimique comme l'augmentation d'énergie libre lorsqu'on ajoute une particule au système physique³, à température et volume du système physique constants. Quant à la pression P , elle peut être obtenue par la relation :

$$P = - \left. \frac{\partial F}{\partial \mathcal{V}} \right|_{N,T} \quad (55)$$

soit, d'après (34) :

$$P = k_B T \left. \frac{\partial \text{Log} Z_c}{\partial \mathcal{V}} \right|_{N,T} \quad (56)$$

qui est similaire à (51). Nous obtenons ainsi la pression du système physique en fonction de son volume et de sa température, c'est-à-dire son "équation d'état".

Pour calculer l'énergie moyenne $\langle \hat{H} \rangle$, on utilise les relations (30) et (31), qui donnent :

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{Z_c} \text{Tr} \{ \hat{H} e^{-\beta \hat{H}} \} = \frac{-1}{Z_c} \frac{\partial}{\partial \beta} \text{Tr} \{ e^{-\beta \hat{H}} \} \quad (57)$$

où la dérivée partielle est prise à N et \mathcal{V} constants. Donc :

$$\langle \hat{H} \rangle = - \frac{1}{Z_c} \frac{\partial Z_c}{\partial \beta} = - \frac{\partial \text{Log} Z_c}{\partial \beta} \quad (58)$$

.

2-c. Grand-canonique

Pour un système macroscopique, en général le nombre de particules fluctue très peu en valeur relative, et nous pouvons remplacer $\langle N \rangle$ par N dans la définition (44) du grand-potentiel thermodynamique Φ . On obtient alors :

$$d\Phi = dF - \mu dN - Nd\mu \quad (59)$$

Si nous reportons (54) dans cette relation, les termes en μdN disparaissent, et il reste :

$$\boxed{d\Phi = -SdT - Pd\mathcal{V} - Nd\mu} \quad (60)$$

3. A température nulle, l'énergie libre s'identifie à l'énergie E , de sorte que μ correspond à l'augmentation d'énergie consécutive à l'ajout d'une particule.

Pour cet ensemble, la seule variable extensive est le volume \mathcal{V} . A température et potentiel chimique fixés, lorsque ce volume est grand on obtient un système macroscopique dont l'énergie, l'entropie, et le nombre de particules sont proportionnels à \mathcal{V} . On a donc simplement :

$$\Phi = -P\mathcal{V} \tag{61}$$

Le grand-potentiel divisé par \mathcal{V} donne donc directement la pression, sans dérivation partielle.

Compte tenu de (45), le nombre moyen de particules et la pression sont donc maintenant déterminés par :

$$\begin{aligned} N &= - \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \right|_{\mathcal{V}, T} = k_B T \left. \frac{\partial \text{Log} Z_{gc}}{\partial \mu} \right|_{\mathcal{V}, T} \\ P &= - \frac{\Phi}{\mathcal{V}} = \frac{k_B T}{\mathcal{V}} \text{Log} Z_{gc} \end{aligned} \tag{62}$$

L'élimination du potentiel chimique μ entre ces deux égalités permet d'obtenir la relation reliant le nombre de particules dans un volume donné à la pression P et la température T (équation d'état du système physique).

2-d. Autres ensembles

Les trois ensembles statistiques que nous avons étudiés sont les plus couramment utilisés, mais ils ne sont pas les seuls. Il existe en effet d'autres ensembles statistiques utiles, par exemple l'ensemble isotherme-isobare. Dans cet ensemble, le réservoir avec lequel le système \mathcal{S} est couplé peut échanger avec lui de l'énergie et du volume, mais pas de particules; le nombre N est donc fixé. La seule variable extensive est cette variable N , les deux autres variables étant intensives : la température T et la pression P . Le potentiel thermodynamique associé à l'ensemble isotherme-isobare est la fonction de Gibbs G définie par :

$$G = E + P\mathcal{V} - TS \tag{63}$$

Le calcul de la différentielle de cette fonction est très semblable aux précédents. Lorsqu'on différencie G et que l'on reporte (52), on constate que les termes en dE et $Pd\mathcal{V}$ disparaissent, et l'on obtient :

$$dG = \mathcal{V}dP - SdT + \mu dN \tag{64}$$

La fonction G est extensive. Si l'on augmente le nombre de particules N (à pression et température fixées), pour un système macroscopique elle croît proportionnellement à la taille du système, et l'on a simplement :

$$G = \mu N \tag{65}$$

Si l'on fait varier la température et la pression d'un ensemble de N particules, la variation du potentiel chimique μ est obtenue en divisant (64) par N et en y faisant $dN = 0$; on obtient ainsi la relation de Gibbs-Duhem :

$$\boxed{d\mu = \frac{\mathcal{V}}{N} dP - \frac{S}{N} dT} \tag{66}$$

L'ensemble isotherme-isobare est particulièrement bien adapté à l'étude de l'équilibre entre deux phases telles qu'un liquide et sa vapeur, l'un et l'autre à la même pression et même température.

Le lecteur intéressé par un exposé moins succinct que le présent résumé des principes généraux de la mécanique statistique pourra consulter par exemple les références [84, 85, 86, 3].

Appendice VII

Transformée de Wigner

1	Fonction delta d'un opérateur	737
2	Distribution de Wigner de l'opérateur densité (particule sans spin)	737
2-a	Définition de la distribution, opérateurs de Weyl	738
2-b	Expressions de la transformée de Wigner	739
2-c	Réalité, normalisation, forme opératorielle	742
2-d	Paquet d'ondes gaussien	743
2-e	Situations semi-classiques	745
2-f	Situations quantiques où la distribution de Wigner n'est pas une distribution de probabilité	748
3	Transformée de Wigner d'un opérateur	749
3-a	Valeur moyenne d'un opérateur hermitique (observable)	750
3-b	Cas particuliers	751
3-c	Transformée de Wigner d'un produit d'opérateurs	751
3-d	Evolution de l'opérateur densité	755
4	Généralisations	757
4-a	Prise en compte du spin	757
4-b	Plusieurs particules	758
5	Discussion physique, distribution de Wigner et effets quantiques	758
5-a	Une expérience d'interférences	758
5-b	Discussion générale ; composante "fantôme"	761

Introduction

En mécanique classique, il est possible de spécifier avec une précision arbitraire à la fois la position \mathbf{r} et l'impulsion \mathbf{p} (donc la vitesse) d'une particule. Si l'état de la particule est défini de façon statistique, on décrit la particule classique par une distribution dans l'espace des phases $\rho_{cl}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, qui est une fonction positive quelconque normée à l'unité ; cette distribution peut par exemple contenir des corrélations entre position et vitesse. En mécanique quantique, la situation est différente. Il est certes courant d'y utiliser deux représentations, l'une dans l'espace des positions et l'autre dans l'espace des impulsions, le passage de l'une à l'autre mettant en jeu une opération de transformation de Fourier. Mais ces deux représentations sont exclusives : en représentation position, on perd toute information sur l'impulsion de la particule (réciproquement, en représentation impulsion, on perd toute information sur la position) ; ainsi, aucune information sur une corrélation éventuelle entre ces deux grandeurs n'est disponible.

Il est donc intéressant d'introduire un point de vue quantique qui soit intermédiaire entre ces deux extrêmes, de façon à conserver à la fois des informations sur position et impulsion, tout en satisfaisant aux règles générales de la mécanique quantique ; ces dernières imposent une certaine limite à la précision des informations. La

transformation de Wigner fournit ce point de vue intermédiaire ; elle permet en effet d'introduire en mécanique quantique une fonction $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ qui permet de calculer les valeurs moyennes de la même façon qu'on le ferait avec une distribution classique $\rho_{cl}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Historiquement, cette transformation a été introduite¹ en 1932 par Wigner [87, 88] dans le cadre de l'étude des corrections quantiques à l'équilibre thermique, mais elle s'avère également un outil bien plus général. Elle fournit très naturellement des développements semi-classiques en puissance de \hbar , par exemple pour l'évolution temporelle d'un système quantique. Nous verrons même qu'elle fournit une méthode de quantification, permettant en particulier d'obtenir des expressions correctement symétrisées des opérateurs quantiques à partir de fonctions classiques des positions et des impulsions. Nombreux sont donc les domaines de la physique où la transformée de Wigner s'avère utile, voire indispensable.

Le but de cet appendice est donc de montrer comment on peut associer à tout opérateur densité quantique une *distribution de Wigner* $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, parfois appelée "distribution semi-classique", et d'en discuter un certain nombre de propriétés. De même, à tout opérateur (observable) A agissant dans l'espace des états, on peut associer une transformée de Wigner $A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ qui est une simple fonction de \mathbf{r} et \mathbf{p} .

Dans les situations classiques ou semi-classiques (celles où les variations spatiales des grandeurs physiques se font sur des distances suffisamment grandes), la fonction $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ possède toutes les propriétés d'une distribution classique : c'est une fonction positive dont l'intégrale du produit par $A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ donne bien la valeur moyenne de l'opérateur A . Nous verrons que la distribution de Wigner reflète simplement dans ce cas l'écoulement du fluide de probabilité. Comme $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ permet de conserver trace des corrélations entre position et impulsion, l'utilisation de cette fonction est particulièrement commode dans un certain nombre de cas, en particulier dans la théorie du transport quantique, dont les applications sont nombreuses.

Dans le cas général où les effets quantiques sont importants (variations spatiales rapides), les relations classiques qui lient la distribution et les valeurs moyennes restent valables, ce qui assure que la distribution de Wigner conserve toute son utilité. Il apparaît cependant une différence notable avec une distribution de probabilités : la fonction $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ peut alors prendre des valeurs négatives. De plus, et comme nous le verrons plus loin, elle peut présenter des composantes "fantômes" où elle est différente de zéro en un point où la probabilité de trouver la particule est nulle. Il n'est donc pas possible d'interpréter le produit $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})d^3rd^3p$ comme la probabilité que la particule occupe une cellule infinitésimale d^3rd^3p de l'espace des phases centrée en (\mathbf{r}, \mathbf{p}) ; une telle interprétation entrerait d'ailleurs en contradiction flagrante avec les relations de Heisenberg pour les très petits volumes infinitésimaux. Il faut donc considérer $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ plutôt comme une "quasi-distribution", un outil qui permet de calculer toutes les valeurs moyennes sans pour autant s'identifier à une véritable distribution de probabilités, même si nous continuerons à utiliser le mot distribution pour nous conformer à l'usage.

Cet appendice fournit les outils qui permettent d'étudier ces différentes situations, et en particulier, d'obtenir des développements en gradients qui fournissent directement des développements en \hbar . Le § 1 constitue un préliminaire où nous introduisons une forme commode de la fonction delta d'un opérateur. Cette forme nous sert ensuite, au § 2, à définir la distribution de Wigner d'un opérateur densité pour

1. Wigner mentionne cependant dans son article que la même transformation avait déjà été utilisée auparavant par L. Szilard, mais dans un autre cadre.

une particule sans spin ; nous en étudierons un certain nombre de caractéristiques, en particulier pour un paquet d'ondes gaussien. Au § 3, nous étudions ensuite la *transformée de Wigner* des opérateurs et montrons comment elle peut être associée à la distribution de Wigner de l'opérateur densité pour effectuer des calculs semblables à ceux correspondant à une distribution classique ; une étape importante est le calcul de la transformée de Wigner associée à un produit d'opérateurs. La généralisation des considérations précédentes pour tenir compte du spin, ainsi que de la présence éventuelle de plusieurs particules en interaction, est présentée au § 4. Enfin, au § 5, nous discutons les propriétés physiques de la transformation de Wigner en l'appliquant à l'analyse d'une expérience d'interférence quantique ; nous montrons en particulier comment apparaissent des "composantes fantômes" (ou composantes vides) de la transformée, qui changent rapidement de signe en fonction de l'impulsion et signalent la présence des effets quantiques.

1. Fonction delta d'un opérateur

Considérons un opérateur hermitique A à spectre continu, dont les valeurs propres sont notées α . Nous définissons un opérateur $D_A(a)$, qui dépend d'un paramètre réel continu a , par :

$$D_A(a) = \frac{1}{2\pi} \int dx e^{ix(A-a)} \quad (1)$$

C'est en quelque sorte un "opérateur fonction delta" associé à la différence entre l'opérateur A et une constante a . Nous appelons $|\alpha, s\rangle$ les vecteurs propres de A ; l'indice s (supposé discret) prend en compte la dégénérescence éventuelle de la valeur propre α . Dans un état quantique défini par un opérateur densité ρ , cet opérateur prend la valeur moyenne :

$$\begin{aligned} \langle D_A(a) \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int dx \text{Tr} \left\{ \rho e^{ix(A-a)} \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dx \int d\alpha \sum_s \langle \alpha, s | e^{ix(A-a)} | \alpha, s \rangle \langle \alpha, s | \rho | \alpha, s \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dx \int d\alpha \sum_s e^{ix(\alpha-a)} \langle \alpha, s | \rho | \alpha, s \rangle \end{aligned} \quad (2)$$

L'intégrale sur dx est égale à $2\pi\delta(\alpha - a)$, et l'on obtient :

$$\langle D_A(a) \rangle = \sum_s \langle a, s | \rho | a, s \rangle = \mathcal{P}(a) \quad (3)$$

où $\mathcal{P}(a)da$ est la probabilité de trouver, lors d'une mesure associée à l'opérateur A , un résultat compris dans l'intervalle $[a, a + da]$.

2. Distribution de Wigner de l'opérateur densité (particule sans spin)

Supposons maintenant que le système physique étudié soit une particule sans spin, décrite par un opérateur densité ρ . Nous désirons introduire une fonction

$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ qui fournisse simultanément des informations sur les probabilités de résultats obtenus en mesurant, soit l'opérateur position \mathbf{R} , soit l'opérateur impulsion \mathbf{P} . Comme il s'agit d'observables incompatibles, il est clair qu'il est impossible de faire des prédictions parfaitement précises concernant à la fois ces deux types de mesures ; la précision est limitée par les relations d'incertitude de Heisenberg. Cette fonction doit donc résulter d'un compromis entre les deux types d'information, compromis associé à une certaine imprécision quantique inévitable. Comme nous l'avons déjà mentionné dans l'introduction, elle constitue en réalité une "quasi-distribution", même si l'habitude est de l'appeler simplement "distribution de Wigner".

2-a. Définition de la distribution, opérateurs de Weyl

Par analogie avec (1), on peut introduire un "opérateur de Weyl" que nous noterons $W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, et qui est en quelque sorte un opérateur "fonction delta" associé simultanément aux opérateurs $\mathbf{R} - \mathbf{r}$ et $\mathbf{P} - \mathbf{p}$. Nous posons donc :

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{\hbar^3} \int \frac{d^3\kappa}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} e^{i[(\mathbf{R}-\mathbf{r})\cdot\kappa + (\mathbf{P}-\mathbf{p})\cdot\mathbf{x}/\hbar]} \tag{4}$$

où la variable d'intégration κ est homogène à un vecteur d'onde (inverse d'une longueur) et \mathbf{x} à une longueur. C'est un opérateur hermitique, comme le montre un changement de signe des deux variables d'intégration. Pour chaque état quantique, la distribution de Wigner $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ est alors définie comme la valeur moyenne dans cet état de cet opérateur :

$$\boxed{\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \langle W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \rangle} \tag{5}$$

Si le système étudié est caractérisé par un opérateur densité $\rho(t)$ de trace unité, cette définition s'écrit :

$$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \text{Tr} \{ \rho(t) W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \} \tag{6}$$

alors que s'il est décrit par un vecteur d'état normé $|\Psi\rangle$, elle devient :

$$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \langle \Psi(t) | W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) | \Psi(t) \rangle \tag{7}$$

L'opérateur densité lui-même et le vecteur d'état sont sans dimension. Compte tenu des facteurs \hbar introduits dans (4), $W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ et $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ sont homogènes à \hbar^{-3} ; le produit $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})d^3r d^3p$ est donc sans dimension, comme le serait une probabilité. Nous allons voir dans ce qui suit que cette distribution possède toute une série de propriétés utiles.

Nous aurons besoin pour la suite des éléments de matrice $\langle \mathbf{r}_1 | W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) | \mathbf{r}_2 \rangle$ de l'opérateur $W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ en représentation position. Ils s'écrivent :

$$\langle \mathbf{r}_1 | W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) | \mathbf{r}_2 \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)/\hbar} \delta\left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} - \mathbf{r}\right) \tag{8}$$

Démonstration :

Pour le montrer, utilisons la relation (63) du Complément B_{II}, qui permet d'exprimer l'exponentielle d'une somme de deux opérateurs A et B comme un produit d'exponentielles, à condition que tous deux commutent avec leur commutateur $[A, B]$:

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \quad (9)$$

Choisissons :

$$A = i(\mathbf{R} - \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad \text{et} \quad B = i(\mathbf{P} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}/\hbar \quad (10)$$

Le commutateur de ces deux opérateurs :

$$[A, B] = -i \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x} \quad (11)$$

est un nombre, de sorte que A et B commutent effectivement avec leur commutateur. Insérons la relation (9) dans (4), il vient :

$$\langle \mathbf{r}_1 | W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) | \mathbf{r}_2 \rangle = \frac{1}{\hbar^3} \int \frac{d^3 \boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 x}{(2\pi)^3} e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x}/2} \langle \mathbf{r}_1 | e^{i(\mathbf{R}-\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\kappa}} e^{i(\mathbf{P}-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}/\hbar} | \mathbf{r}_2 \rangle \quad (12)$$

Mais la relation (13) du Complément E_{II} indique que l'opérateur $e^{i\mathbf{P} \cdot \mathbf{x}/\hbar}$ effectue simplement une translation de $-\mathbf{x}$ de la valeur propre de la position, de sorte que :

$$e^{i(\mathbf{P}-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}/\hbar} | \mathbf{r}_2 \rangle = e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}/\hbar} | \mathbf{r}_2 - \mathbf{x} \rangle \quad (13)$$

La fonction à intégrer dans (12) devient alors :

$$e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x}/2} \langle \mathbf{r}_1 | e^{i(\mathbf{R}-\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\kappa}} e^{i(\mathbf{P}-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}/\hbar} | \mathbf{r}_2 \rangle = e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{x}/2} e^{i(\mathbf{r}_2 - \mathbf{x} - \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\kappa}} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}/\hbar} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 + \mathbf{x}) \quad (14)$$

La fonction delta absorbe alors l'intégrale sur $d^3 x$ de (12), ce qui conduit à remplacer dans l'exposant \mathbf{x} par $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ ainsi que $\mathbf{r}_2 - \mathbf{x}$ par \mathbf{r}_1 ; il vient alors :

$$\langle \mathbf{r}_1 | W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) | \mathbf{r}_2 \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3 \boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^3} e^{i[\boldsymbol{\kappa} \cdot (\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} - \mathbf{r}) - \mathbf{p} \cdot (\frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{\hbar})]} \quad (15)$$

L'intégration sur $d^3 \boldsymbol{\kappa}$ introduit alors une fonction delta, et l'on obtient (8).

2-b. Expressions de la transformée de Wigner

La définition (5) de la transformation de Wigner peut conduire à des expressions diverses, selon la représentation que l'on utilise dans l'espace des états.

α. Représentation position

Si nous utilisons la représentation position pour calculer la trace qui figure dans (6), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) &= \int d^3 r_2 \int d^3 r_1 \langle \mathbf{r}_2 | \rho(t) | \mathbf{r}_1 \rangle \langle \mathbf{r}_1 | W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) | \mathbf{r}_2 \rangle \\ &= \int d^3 R \int d^3 y \left\langle \mathbf{R} + \frac{\mathbf{y}}{2} \left| \rho(t) \right| \mathbf{R} - \frac{\mathbf{y}}{2} \right\rangle \left\langle \mathbf{R} - \frac{\mathbf{y}}{2} \left| W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \right| \mathbf{R} + \frac{\mathbf{y}}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (16)$$

où, dans la seconde ligne, nous avons utilisé les variables d'intégration $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ et $\mathbf{y} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}$. Lorsque nous reportons (8) dans cette expression, la fonction $\delta(\mathbf{R} - \mathbf{r})$ fait disparaître l'intégration sur d^3R , et il vient :

$$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3y e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2} \left| \rho(t) \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2} \right\rangle \quad (17)$$

Cette relation est souvent utilisée comme définition de la distribution de Wigner. Son intégrale sur $d^3p/(2\pi\hbar)^3$ fait apparaître une fonction $\delta(\mathbf{y})$, de sorte que :

$$\int d^3p \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \langle \mathbf{r} | \rho(t) | \mathbf{r} \rangle = n(\mathbf{r}, t) \quad (18)$$

On retrouve ainsi une propriété des distributions classiques dans l'espace des phases : l'intégrale de la distribution sur l'impulsion donne la densité de probabilité $n(\mathbf{r}, t)$ de trouver la particule au point \mathbf{r} .

Dans le cas particulier où la particule est décrite par un état pur $|\Psi\rangle$ – cf. relation (7) –, la définition de la distribution de Wigner devient :

$$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3y e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} \Psi\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2}; t\right) \Psi^*\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2}; t\right) \quad (19)$$

où $\Psi(\mathbf{r}; t)$ est la fonction d'onde en représentation position :

$$\Psi(\mathbf{r}; t) = \langle \mathbf{r} | \Psi(t) \rangle \quad (20)$$

β. Représentation impulsion

Comme position et impulsion jouent des rôles symétriques dans le raisonnement, on s'attend à ce qu'il existe une relation semblable à la précédente qui fasse intervenir les éléments de matrice de l'opérateur densité ρ en représentation impulsion. Effectivement, nous montrons ci-dessous que :

$$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \left\langle \mathbf{p} + \frac{\mathbf{q}}{2} \left| \rho(t) \right| \mathbf{p} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right\rangle \quad (21)$$

Cette expression est bien l'analogue de (17); elle aussi peut être considérée comme une autre définition possible de la distribution de Wigner. Comme pour (18), on montre immédiatement que :

$$\int d^3r \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \langle \mathbf{p} | \rho(t) | \mathbf{p} \rangle \quad (22)$$

Ainsi, comme pour une distribution classique, l'intégrale sur les positions de la distribution de Wigner donne la densité de probabilité de trouver une impulsion donnée \mathbf{p} .

Démonstration :

Si l'on insère dans l'élément de matrice de (17) deux relations de fermeture sur des ondes planes normées d'impulsions \mathbf{q}' et \mathbf{q}'' , il s'introduit les produits scalaires :

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2} \mid \mathbf{q}' \right\rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{q}' \cdot (\mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2})/\hbar} \\ \left\langle \mathbf{q}'' \mid \mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2} \right\rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\mathbf{q}'' \cdot (\mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2})/\hbar} \end{aligned} \quad (23)$$

de sorte que :

$$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d^3y e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{y}/\hbar} \int d^3q' \int d^3q'' e^{i\mathbf{q}' \cdot (\mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2})/\hbar} e^{-i\mathbf{q}'' \cdot (\mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2})/\hbar} \langle \mathbf{q}' \mid \rho(t) \mid \mathbf{q}'' \rangle \quad (24)$$

Il apparaît alors l'expression :

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3y e^{i\left(\frac{\mathbf{q}' + \mathbf{q}''}{2} - \mathbf{p}\right) \cdot \mathbf{y}/\hbar} = \delta\left(\frac{\mathbf{q}' + \mathbf{q}''}{2} - \mathbf{p}\right) \quad (25)$$

de sorte que, si l'on prend $\mathbf{Q} = (\mathbf{q} + \mathbf{q}')/2$ et $\mathbf{q} = \mathbf{q}' - \mathbf{q}''$ comme variables d'intégration, on obtient (21).

Dans le cas particulier où la particule est décrite par un état pur $|\Psi\rangle$, la relation (21) devient :

$$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \bar{\Psi}\left(\mathbf{p} + \frac{\mathbf{q}}{2}; t\right) \Psi^*\left(\mathbf{p} - \frac{\mathbf{q}}{2}; t\right) \quad (26)$$

où $\bar{\Psi}(\mathbf{p}; t)$ est la fonction d'onde en représentation impulsion :

$$\bar{\Psi}(\mathbf{p}; t) = \langle \mathbf{p} \mid \Psi(t) \rangle \quad (27)$$

Si la fonction d'onde est factorisée² :

$$\bar{\Psi}(\mathbf{p}; t) = \bar{\psi}_x(p_x; t) \times \bar{\psi}_y(p_y; t) \times \bar{\psi}_z(p_z; t) \quad (28)$$

la relation (26) montre que la transformée de Wigner se factorise également :

$$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \rho_W^x(x, p_x; t) \times \rho_W^y(y, p_y; t) \times \rho_W^z(z, p_z; t) \quad (29)$$

avec :

$$\rho_W^x(x, p_x; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dq e^{iqx/\hbar} \bar{\psi}_x\left(p_x + \frac{q}{2}; t\right) \psi_x^*\left(p_x - \frac{q}{2}; t\right) \quad (30)$$

Les deux autres composantes $\rho_W^y(y, p_y; t)$ et $\rho_W^z(z, p_z; t)$ sont définies de façon semblable. C'est un cas particulier où l'on peut raisonner séparément pour chacune des trois dimensions.

2. Il revient au même de supposer que la fonction d'onde est factorisée en représentation impulsion ou position.

γ . *Inversion des relations*

Nous avons vu qu'à tout opérateur densité correspond une distribution de Wigner unique et bien définie. Inversement, si l'on se donne cette distribution, il est possible de reconstruire l'opérateur qui lui correspond, grâce à l'expression de ses éléments de matrice. Pour prendre la transformée de Fourier inverse de (17), multiplions cette relation par $e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{z}/\hbar}$ et intégrons sur d^3p ; nous obtenons :

$$\int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{z}/\hbar} \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \int d^3y e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{z}-\mathbf{y})/\hbar} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2} \left| \rho(t) \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2} \right\rangle \quad (31)$$

L'intégrale sur d^3p fait apparaître une fonction $(2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{z} - \mathbf{y})$ dans le second membre, de sorte que cette égalité devient :

$$\int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{z}/\hbar} \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{z}}{2} \left| \rho(t) \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{z}}{2} \right\rangle \quad (32)$$

Il suffit alors de poser $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r} + \mathbf{z}/2$ et $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r} - \mathbf{z}/2$ pour obtenir les éléments de matrice de ρ en représentation position par la relation :

$$\boxed{\langle \mathbf{r}_1 | \rho(t) | \mathbf{r}_2 \rangle = \int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\hbar} \rho_W\left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \mathbf{p}; t\right)} \quad (33)$$

La donnée de la distribution de Wigner $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ définit donc l'opérateur ρ de façon unique.

De même, en multipliant (21) par $e^{-i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar}$ et en intégrant sur d^3r , puis en posant $\mathbf{p}' = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2$ et $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)/2$, on obtient la relation d'inversion en représentation impulsion :

$$\boxed{\langle \mathbf{p}_1 | \rho(t) | \mathbf{p}_2 \rangle = \int d^3r e^{i(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)\cdot\mathbf{r}/\hbar} \rho_W\left(\mathbf{r}, \frac{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2}{2}; t\right)} \quad (34)$$

2-c. Réalité, normalisation, forme opératorielle

Prenons la relation complexe conjuguée de (17). L'opérateur densité est hermitique, de sorte que :

$$\left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2} \left| \rho(t) \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2} \right\rangle^* = \left\langle \mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2} \left| \rho(t) \right| \mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2} \right\rangle \quad (35)$$

Un changement de signe de la variable d'intégration \mathbf{y} permet alors d'obtenir à nouveau (17); la distribution $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ est donc égale à sa complexe conjuguée, ce qui montre qu'elle est réelle.

Calculons maintenant l'intégrale de $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ dans tout l'espace des phases. Si nous sommions (18) sur d^3r , nous obtenons :

$$\int d^3r \int d^3p \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \int d^3r \langle \mathbf{r} | \rho(t) | \mathbf{r} \rangle = \text{Tr} \{ \rho(t) \} = 1 \quad (36)$$

où la dernière égalité résulte du fait que la trace de l'opérateur densité est égale à un. La distribution de Wigner de l'opérateur densité est donc une fonction réelle normée à l'unité dans l'espace des phases, comme l'est une distribution classique.

Remarque :

L'opérateur densité satisfait à une contrainte plus forte que celle de la seule valeur de sa trace. Il est en effet défini positif, ce qui signifie que :

$$\langle \varphi | \rho(t) | \varphi \rangle \geq 0 \quad (37)$$

quel que soit le ket $|\varphi\rangle$. Or cette condition n'est pas simplement équivalente à une condition de positivité de la transformée de Wigner ; nous verrons dans ce qui suit que la distribution de Wigner d'un opérateur densité peut devenir négative en certains points de l'espace des phases. Mais seules sont acceptables pour décrire un système quantique les distributions de Wigner $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ qui conduisent à un opérateur obéissant à la contrainte (37). Il est donc plus compliqué en mécanique quantique qu'en mécanique classique de savoir si une distribution dans l'espace des phases est acceptable ou non.

Les relations (33) et (34) peuvent s'écrire sous une forme opératorielle simple :

$$\rho(t) = (2\pi\hbar)^3 \int d^3r \int d^3p \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (38)$$

Dans cette relation, $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ est la distribution de Wigner, donc une fonction de la position et de l'impulsion, mais $W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ est l'opérateur de Weyl défini en (4). Pour le montrer, calculons les éléments de matrice de cette égalité entre le bra $\langle \mathbf{r}_1 |$ et le ket $|\mathbf{r}_2\rangle$ afin de vérifier que nous retrouvons bien la relation (33). Compte tenu de (8), les éléments de matrice du second membre sont :

$$\begin{aligned} (2\pi\hbar)^3 \int d^3r \int d^3p \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \langle \mathbf{r}_1 | W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) | \mathbf{r}_2 \rangle \\ = \int d^3r \int d^3p \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)/\hbar} \delta\left(\frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2}{2}-\mathbf{r}\right) \\ = \int d^3p \rho_W\left(\frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2}{2}, \mathbf{p}\right) e^{-i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)/\hbar} \end{aligned} \quad (39)$$

qui redonne bien l'intégrale de (33).

2-d. Paquet d'ondes gaussien

Un cas particulier où tous les calculs peuvent être menés jusqu'au bout est celui du paquet d'ondes gaussien à une dimension, que nous avons étudié au Complément G_I . La relation (1) de ce complément fournit la fonction d'onde normée $\psi_x(x)$ d'un tel paquet d'ondes en représentation position ; nous la modifions cependant légèrement afin de centrer le paquet d'ondes en une valeur x_0 non nulle quelconque de la position, et nous remplaçons la variable k par $p = \hbar k$ (nous posons en particulier

$p_0 = \hbar k_0$). Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} \psi_x(x) &= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int \frac{dp}{\hbar} e^{-a^2(p-p_0)^2/4\hbar^2} e^{ip(x-x_0)/\hbar} \\ &= \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ip_0 x/\hbar} e^{-(x-x_0)^2/a^2} \end{aligned} \quad (40)$$

où la seconde égalité est celle écrite en (9) dans le Complément G_I (à une translation près de x_0 le long de Ox). Les ondes planes d'impulsion p (et normalisées par rapport à cette impulsion) ont pour fonction d'onde $(2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$; la forme de la première égalité (40) fait donc directement apparaître la fonction d'onde en représentation impulsion :

$$\bar{\psi}_x(p) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \sqrt{\frac{a}{\hbar}} e^{-a^2(p-p_0)^2/4\hbar^2} e^{-ipx_0/\hbar} \quad (41)$$

La distribution de Wigner (30) devient alors (pour simplifier, nous abandonnons provisoirement la dépendance temporelle) :

$$\begin{aligned} \rho_W^x(x, p_x) &= \frac{a}{(2\pi)^{3/2} \hbar^2} \int dq e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2} [(p_x - p_0 + \frac{q}{2})^2 + (p_x - p_0 - \frac{q}{2})^2]} e^{i\frac{q(x-x_0)}{\hbar}} \\ &= \frac{a}{(2\pi)^{3/2} \hbar^2} e^{-\frac{a^2}{2\hbar^2} (p_x - p_0)^2} \int dq e^{-\frac{a^2 q^2}{8\hbar^2}} e^{i\frac{q(x-x_0)}{\hbar}} \end{aligned} \quad (42)$$

L'intégrale sur dq est une transformée de Fourier dont la valeur peut être obtenue en remplaçant a par $a/\sqrt{2}$ dans la relation (50) de l'Appendice I. Ceci conduit à :

$$\begin{aligned} \rho_W^x(x, p_x) &= \frac{a}{(2\pi)^{3/2} \hbar^2} e^{-\frac{a^2}{2\hbar^2} (p_x - p_0)^2} \times \sqrt{2\pi\hbar} \times \frac{\sqrt{2\hbar}}{(a/\sqrt{2})} e^{-2(x-x_0)^2/a^2} \\ &= \frac{1}{\pi\hbar} e^{-\frac{a^2}{2\hbar^2} (p_x - p_0)^2} e^{-2\frac{(x-x_0)^2}{a^2}} \end{aligned} \quad (43)$$

Compte tenu de (40) et (41), la distribution n'est autre que le produit des densités de probabilité dans l'espace des positions et celui des impulsions :

$$\rho_W^x(x, p_x) = |\psi_x(x)|^2 \times |\bar{\psi}_x(p)|^2 \quad (44)$$

Le résultat ainsi obtenu est particulièrement simple : la transformée de Wigner du paquet d'ondes gaussien ne contient aucune corrélation entre les variables x et p ; elle se factorise en deux gaussiennes, une fonction gaussienne de l'impulsion et une autre de la position. La première est centrée sur l'impulsion moyenne p_0 , et sa largeur est de l'ordre de \hbar/a ; la seconde sur la position moyenne x_0 , et sa largeur est de l'ordre de a . Ces deux largeurs entrent bien dans les limites imposées par les relations de Heisenberg. On remarque que, dans ce cas, la transformée de Wigner reste positive pour toutes les valeurs de ses variables, comme dans les situations semi-classiques que nous étudions au § 2-e.

Remarque :

Nous avons dans ce qui précède ignoré la dépendance temporelle du paquet d'ondes. Pour la prendre en compte (en supposant la particule libre), on peut dans (41) multiplier $\overline{\psi}_x(p)$ par $e^{-i\omega_p t}$ avec :

$$\omega_p = \frac{p^2}{2m\hbar} \quad (45)$$

où m est la masse de la particule. Ceci introduit dans l'intégrale de la seconde ligne de (42) une exponentielle supplémentaire $e^{-ip_x q t / (2m\hbar)}$ dont l'effet sur la transformée de Fourier est d'effectuer la substitution :

$$x \Rightarrow x - \frac{p_x}{m} t \quad (46)$$

Ceci correspond simplement au mouvement de la particule avec une vitesse p/m . Lorsque l'on effectue cette substitution dans (43), on constate que la distribution de Wigner est toujours un produit de deux gaussiennes, mais n'est plus le produit d'une fonction de l'impulsion par une fonction de la position : des corrélations sont apparues entre les deux variables.

2-e. Situations semi-classiques

Dans quelle mesure est-il possible de considérer la transformée de Wigner comme une véritable distribution de probabilités? Les relations (18) et (22) sembleraient pousser en ce sens, puisqu'elles indiquent que l'intégrale sur les impulsions ou celle sur les positions fournissent effectivement une distribution de probabilités, celle de trouver la particule en un point donné ou avec une impulsion donnée. Les deux "distributions marginales" ainsi obtenues par intégration fournissent donc toutes deux des distributions de probabilité. Mais cela ne suffit pas à assurer que la fonction $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ elle-même (avant intégration) possède la même propriété. En fait, nous avons déjà mentionné dans l'introduction qu'en général il n'est pas possible d'interpréter le produit $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d^3r d^3p$ comme fournissant directement la probabilité pour que la particule occupe une cellule infinitésimale $d^3r d^3p$ de l'espace des phases, centrée en (\mathbf{r}, \mathbf{p}) . C'est d'ailleurs bien compréhensible : une telle distribution de probabilité ne peut avoir aucun sens en mécanique quantique, puisque les relations de Heisenberg interdisent l'existence d'un état quantique défini de façon arbitrairement précise à la fois dans l'espace des positions et des impulsions.

Il existe cependant des situations simples, que nous qualifierons de "semi-classiques", où la transformée de Wigner est très semblable à une distribution classique de probabilités ; pour que ce soit le cas, il faut que les variations dans l'espace de toutes les quantités physiques soient suffisamment lentes (à une échelle que nous allons préciser). Ce sont ces situations que nous commençons par étudier maintenant. Dans la partie suivante, nous envisagerons ensuite d'autres situations plus générales, où les propriétés de la transformée de Wigner sont très différentes ; en particulier elle peut devenir négative, ce qui exclut immédiatement toute interprétation comme une densité de probabilité.

α. Paquet d'ondes à variations spatiales lentes

Considérons la fonction d'onde :

$$\psi(\mathbf{r}) = C(\mathbf{r}) e^{iS(\mathbf{r})} \quad (47)$$

où $C(\mathbf{r})$ est le module de la fonction d'onde et $S(\mathbf{r})$ sa phase. La densité de probabilité de présence est alors $[C(\mathbf{r})]^2$, tandis que la relation (D-17) du chapitre III fournit le courant de probabilité $\mathbf{J}(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} [C(\mathbf{r})]^2 \times \nabla S(\mathbf{r}) \quad (48)$$

L'opérateur densité correspondant a pour éléments de matrice :

$$\langle \mathbf{r}' | \rho(t) | \mathbf{r}'' \rangle = C(\mathbf{r}') C(\mathbf{r}'') e^{i[S(\mathbf{r}') - S(\mathbf{r}'')]} \quad (49)$$

Nous supposons que, localement, la fonction d'onde se comporte comme une onde plane :

$$\psi(\mathbf{r}) \simeq C(\mathbf{r}) e^{i[\mathbf{k}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{r} + \alpha(\mathbf{r})]} \quad \text{au voisinage de chaque point } \mathbf{r} \quad (50)$$

et que les deux fonctions $C(\mathbf{r})$ et $\mathbf{k}(\mathbf{r})$, ainsi que la phase $\alpha(\mathbf{r})$, varient lentement dans l'espace : leur variations restent négligeables sur une distance de l'ordre de la longueur d'onde de de Broglie $2\pi/k(\mathbf{r})$. Lorsque \mathbf{r}' et \mathbf{r}'' sont suffisamment proches, on peut développer l'argument de l'exponentielle de (49) ; les éléments de matrice $\langle \mathbf{r}' | \rho(t) | \mathbf{r}'' \rangle$ de l'opérateur densité ont donc la forme suivante :

$$\langle \mathbf{r}' | \rho(t) | \mathbf{r}'' \rangle \simeq C(\mathbf{r}') C(\mathbf{r}'') e^{i\mathbf{K}(\mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')} \quad \text{avec : } \mathbf{K}(\mathbf{r}) = \nabla S \left(\frac{\mathbf{r}' + \mathbf{r}''}{2} \right) \quad (51)$$

$\beta.$ *Opérateur densité ; lien avec le fluide de probabilité*

Pour définir de façon plus générale une situation semi-classique, il est utile de raisonner maintenant en termes d'opérateur densité, sans nous limiter comme ci-dessus à un état pur. En premier lieu, nous supposons qu'il n'existe pas d'ordre non diagonal à grande distance³ :

$$|\langle \mathbf{r}' | \rho(t) | \mathbf{r}'' \rangle| \rightarrow 0 \quad \text{si} \quad |\mathbf{r}' - \mathbf{r}''| \gg l \quad (52)$$

où l est une longueur de cohérence microscopique. Pour un état pur, l est déterminé par la dimension du domaine où le module $C(\mathbf{r})$ de la fonction d'onde n'est pas nul. Pour un mélange statistique d'états, la situation est différente : les phases des diverses fonctions d'onde peuvent se brouiller rapidement, de sorte que l peut être bien plus petit ; nous supposons cependant que l reste supérieur à quelques longueurs d'onde de de Broglie $2\pi/k(\mathbf{r}')$ et que, quand la distance entre \mathbf{r}' et \mathbf{r}'' est petite devant l , les éléments de matrice non diagonaux de l'opérateur densité varient de la même façon qu'en (51) :

$$\langle \mathbf{r}' | \rho(t) | \mathbf{r}'' \rangle \simeq F(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') e^{i\mathbf{K}(\mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')} \quad \text{si} \quad |\mathbf{r}' - \mathbf{r}''| \lesssim l \quad (53)$$

Cette expression n'est autre que la généralisation de (51), qui n'était valable que pour un état pur ; la fonction réelle $F(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')$ remplace le produit des modules

3. La notion d'ordre non diagonal à grande distance est introduite au Complément A_{XVI}, §§ 2-a et 3-c, où nous montrons en particulier son lien avec l'existence d'une condensation de Bose-Einstein. L'hypothèse que nous faisons concernant l'absence d'ordre à grande distance exclut donc que $\rho(t)$ soit l'opérateur densité à un corps d'un système de bosons condensés.

$C(\mathbf{r}')C(\mathbf{r}'')$. Nous supposons que $F(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')$ ainsi que $\mathbf{K}(\mathbf{r})$ varient peu lorsque les variables \mathbf{r}' et \mathbf{r}'' varient d'une grandeur comparable à l .

Lorsque ces hypothèses sont vérifiées, les valeurs de la variable d'intégration qui contribuent à l'intégrale de la relation (17) sont alors telles que $|\mathbf{y}| \lesssim l$, de sorte que :

$$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \simeq \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_D d^3y e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} F\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2}, \mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2}\right) e^{i\mathbf{K}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{y}} \quad (54)$$

où le domaine d'intégration D est centré en $\mathbf{y} = 0$ et a une dimension de l'ordre de quelques longueurs de cohérence l . Mais, comme la fonction F est pratiquement constante dans ce domaine, et comme $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \rho(t) | \mathbf{r} \rangle$, on a également :

$$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \simeq \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \langle \mathbf{r} | \rho(t) | \mathbf{r} \rangle \int_D d^3y e^{i[\mathbf{K}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{y} - \mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar]} \quad (55)$$

soit encore :

$$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \simeq \langle \mathbf{r} | \rho(t) | \mathbf{r} \rangle \times \bar{g}[\mathbf{p} - \mathbf{p}_0(\mathbf{r})] \quad (56)$$

Dans cette expression, nous avons utilisé les définitions suivantes :

$$\bar{g}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_D d^3y e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} \quad (57)$$

et :

$$\mathbf{p}_0(\mathbf{r}) = \hbar \mathbf{K}(\mathbf{r}) \quad (58)$$

La fonction $\bar{g}(\mathbf{p})$ est une distribution d'impulsions centrée en $\mathbf{p} = 0$, de largeur $\Delta p \sim \hbar/l$ et normée à l'unité; en effet, l'intégrale de $\bar{g}(\mathbf{p})$ sur les impulsions fait apparaître une fonction $\delta(y)$, qui absorbe l'intégration sur d^3y et donne l'unité. Dans (56), c'est la valeur de cette fonction pour l'impulsion $\mathbf{p} - \mathbf{p}_0(\mathbf{r})$ qui intervient, ce qui centre la distribution en impulsions à la valeur $\mathbf{p}_0(\mathbf{r})$; la dépendance en \mathbf{r} de cette impulsion introduit alors des corrélations entre positions et impulsions dans $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$.

L'expression (56) de la distribution $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ s'interprète comme la distribution classique dans l'espace des phases d'un fluide de probabilité : c'est le produit de la densité locale de probabilité $\langle \mathbf{r} | \rho(t) | \mathbf{r} \rangle$ par une fonction de l'impulsion $\bar{g}[\mathbf{p} - \mathbf{p}_0(\mathbf{r})]$ centrée autour de la valeur de $\mathbf{p}_0(\mathbf{r})$ définie en (58). Or $\mathbf{p}_0(\mathbf{r})$ est précisément la valeur de l'impulsion qui, divisée par m (pour passer d'une impulsion à une vitesse) et multipliée par la densité de probabilité, redonne le courant de probabilité $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ du fluide. On notera que la distribution conserve autour de $\mathbf{p}_0(\mathbf{r})$ une certaine largeur, de l'ordre de \hbar/l , découle des contraintes imposées par la relation de Heisenberg. Pour finir, dans un tel cas, la distribution de Wigner reflète directement la répartition spatiale de la probabilité ainsi que celle du courant local qui lui est associé; elle décrit tout simplement l'écoulement du "fluide de probabilité" (Chapitre III, § D-1-c- β), de façon analogue à la distribution dans l'espace des phases d'un ensemble de particules classiques constituant un fluide en mouvement.

2-f. Situations quantiques où la distribution de Wigner n'est pas une distribution de probabilité

Dans les exemples précédents, les propriétés de la distribution de Wigner rappellent de très près celles d'une distribution classique. Mais ce n'est pas toujours le cas : en général, la transformée de Wigner peut devenir négative, même si cela peut paraître surprenant.

α. Fonction d'onde impaire

Un cas très simple permet de s'en convaincre immédiatement : à une seule dimension, supposons que la fonction d'onde soit impaire, comme c'est le cas par exemple pour le premier niveau excité de l'oscillateur harmonique. On a alors, selon la relation (19) :

$$\begin{aligned} \rho_W^x(x=0, p_x=0) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dy \psi_x\left(\frac{y}{2}\right) \psi_x^*\left(-\frac{y}{2}\right) \\ &= -\frac{1}{2\pi\hbar} \int dy \left| \psi_x\left(\frac{y}{2}\right) \right|^2 \end{aligned} \quad (59)$$

qui est évidemment négative. Comme les fonctions d'onde impaires se produisent souvent en mécanique quantique, nous voyons ainsi qu'il existe de nombreuses situations où la distribution de Wigner possède des propriétés inattendues pour une distribution ; en fait, et en toute rigueur, il faudrait constamment utiliser le mot "quasi-distribution".

β. Fonction d'onde à deux pics

Considérons maintenant le cas où la fonction d'onde de la particule est la somme de deux paquets d'ondes, l'un localisé autour de $x = +b$, l'autre localisé autour de $x = -b$:

$$\psi_x(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi(x-b) + e^{i\chi}\varphi(x+b)] \quad (60)$$

où la fonction d'onde $\varphi(x)$ est normée ; le facteur de phase relative χ est arbitraire. Pour simplifier la discussion, nous supposons que $\varphi(x)$ est nulle si $|x| > a$ et qu'elle est paire. Nous nous plaçons dans le cas où $b \gg a$, de sorte que les deux paquets d'ondes constituant la fonction d'onde totale sont bien séparés.

Calculons alors la distribution de Wigner au point $x = 0$, donc en un point où la fonction d'onde $\psi_x(x)$ est nulle. A une dimension, la relation (19) s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \rho_W^x(x=0, p_x) &= \frac{1}{4\pi\hbar} \int dy e^{-ip_x y/\hbar} \left[\varphi\left(\frac{y}{2}-b\right) + e^{i\chi}\varphi\left(\frac{y}{2}+b\right) \right] \\ &\quad \times \left[\varphi^*\left(-\frac{y}{2}-b\right) + e^{-i\chi}\varphi^*\left(-\frac{y}{2}+b\right) \right] \end{aligned} \quad (61)$$

Dans cette expression, les fonctions φ sont nulles si leur variable est supérieure en module à a . Par exemple, $\varphi\left(\frac{y}{2}-b\right)$ n'est différente de zéro que si $y \simeq 2b$, tandis que $\varphi^*\left(-\frac{y}{2}-b\right)$ n'est différente de zéro que si $y \simeq -2b$; leur produit est toujours donc

nul. En fait, dans le produit des deux crochets, seuls subsistent les termes “croisés”, et l’on obtient (compte tenu de ce que nous avons supposé la fonction φ paire) :

$$\rho_W^x(x=0, p_x) = \frac{1}{4\pi\hbar} \int dy e^{-ip_x y/\hbar} \left[e^{-ix} \left| \varphi\left(b - \frac{y}{2}\right) \right|^2 + e^{ix} \left| \varphi\left(b + \frac{y}{2}\right) \right|^2 \right] \quad (62)$$

soit encore, grâce à un changement de signe de la variable d’intégration y pour le second terme du crochet :

$$\rho_W^x(x=0, p_x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dy \cos\left(\frac{p_x y}{\hbar} + \chi\right) \left| \varphi\left(b - \frac{y}{2}\right) \right|^2 \quad (63)$$

A la limite où la largeur a devient très petite, le module au carré de la fonction d’onde φ sous l’intégrale se comporte comme une fonction $\delta(b - y/2)$, et l’on obtient :

$$\rho_W^x(x=0, p_x) \simeq \frac{1}{\pi\hbar} \cos\left(\frac{2bp_x}{\hbar} + \chi\right) \quad (64)$$

Ce résultat illustre bien à la fois deux propriétés de la distribution de Wigner qui peuvent paraître surprenantes : en premier lieu, la distribution est non nulle au point $x = 0$, alors que la probabilité d’y trouver la particule dans une mesure de position est strictement nulle ; en second lieu, elle est une fonction oscillante en fonction de l’impulsion, prenant alternativement des valeurs positives et négatives, alors qu’une distribution classique reste toujours positive ou nulle. Ces deux propriétés sont d’ailleurs liées : si l’on intègre la distribution sur toutes les impulsions p_x possibles, on trouve bien zéro, en conformité avec la relation (18) qui indique que l’intégrale sur les impulsions de la distribution de Wigner reconstruit la probabilité de présence de la particule en chaque point. Nous reviendrons plus en détail sur les propriétés de la distribution de Wigner pour une fonction d’onde à deux pics au § 5-a.

3. Transformée de Wigner d’un opérateur

Considérons maintenant un opérateur A quelconque agissant dans l’espace des états de la particule. Nous définissons sa transformée de Wigner $A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ comme pour un opérateur densité, mais sans le préfacteur $1/(2\pi\hbar)^3$ qui figure avant les intégrales de (17) et (21) :

$$\begin{aligned} A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) &= \int d^3y e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2} \left| A \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2} \right\rangle \\ &= \int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \left\langle \mathbf{p} + \frac{\mathbf{q}}{2} \left| A \right| \mathbf{p} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (65)$$

Pour alléger la notation, nous n’avons pas inclus de dépendance temporelle dans cette définition ; mais on peut directement y remplacer A par $A(t)$ et $A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ par $A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$, sans autre modification. Les relations d’inversion (33) et (34) deviennent alors :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1 | A | \mathbf{r}_2 \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\hbar} A_W\left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \mathbf{p}\right) \\ \langle \mathbf{p}_1 | A | \mathbf{p}_2 \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r e^{i(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)\cdot\mathbf{r}/\hbar} A_W\left(\mathbf{r}, \frac{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2}{2}\right) \end{aligned} \quad (66)$$

Une opération de conjugaison complexe de la relation (65) montre que la transformée de Wigner d'un opérateur A hermitique est nécessairement une fonction réelle ; de même, la conjugaison complexe de (66) indique que c'est une condition suffisante.

Compte tenu de l'absence du facteur $1/(2\pi\hbar)^3$ dans la définition (65), l'équivalent de la relation (38) est maintenant :

$$A = \int d^3r \int d^3p A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \tag{67}$$

Nous avons vu plus haut que l'opérateur $W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ est hermitique. Cette relation permet donc de construire un opérateur hermitique A à partir de toute fonction réelle $A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ de la position et de l'impulsion. En d'autres termes, nous obtenons ainsi une procédure de quantification s'appliquant à toute fonction classique, souvent appelée "quantification de Weyl" ou "quantification dans l'espace des phases" [89, 90, 91]. Si l'on part de deux fonctions $A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ et $B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, dont le produit commute évidemment, on obtient ainsi deux opérateurs A et B qui, en général, ne commutent pas. On parle aussi parfois de "quantification géométrique" pour désigner une opération qui introduit dans l'espace des phases une structure non commutative.

3-a. Valeur moyenne d'un opérateur hermitique (observable)

Calculons alors la valeur moyenne de l'opérateur A dans l'état quantique défini par l'opérateur densité $\rho(t)$:

$$\langle A \rangle = \text{Tr} \{ \rho(t) A \} = \int d^3r_1 \int d^3r_2 \langle \mathbf{r}_1 | \rho(t) | \mathbf{r}_2 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | A | \mathbf{r}_1 \rangle \tag{68}$$

Nous montrons ci-dessous que :

$$\boxed{\langle A \rangle = \int d^3r \int d^3p \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})} \tag{69}$$

Cette relation est l'exacte analogue de la relation que l'on obtiendrait avec une distribution classique. C'est elle qui explique pourquoi l'on qualifie la transformée de Wigner de l'opérateur densité de "distribution quasi classique", ou plus simplement de "distribution".

Démonstration :

Le report dans (68) des égalités (33) et (66) conduit à :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r_1 \int d^3r_2 \int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)/\hbar} \int d^3p' e^{-i\mathbf{p}'\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)/\hbar} \\ &\quad \times \rho_W\left(\frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2}{2}, \mathbf{p}; t\right) A_W\left(\frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2}{2}, \mathbf{p}'\right) \end{aligned} \tag{70}$$

Remplaçons alors les variables d'intégration \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 par les variables :

$$\mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \quad ; \quad \mathbf{r}' = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \tag{71}$$

La somme sur d^3r' introduit une fonction delta :

$$(2\pi)^3 \delta\left(\frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}{\hbar}\right) = (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \tag{72}$$

qui supprime l'intégrale sur d^3p' . Nous obtenons finalement (69).

3-b. Cas particuliers

Dans le cas particulier où l'opérateur A est une fonction du seul opérateur position :

$$A = F(\mathbf{R}) \quad \text{d'où :} \quad \langle \mathbf{r}_1 | A | \mathbf{r}_2 \rangle = F(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (73)$$

la première ligne de (65) conduit à :

$$A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = F(\mathbf{r}) \quad (74)$$

La transformée de Wigner de l'opérateur est donc simplement la fonction $F(\mathbf{r})$, indépendante de l'impulsion \mathbf{p} .

De même, lorsque A est une fonction du seul opérateur impulsion :

$$A = G(\mathbf{P}) \quad \text{d'où :} \quad \langle \mathbf{p}_1 | A | \mathbf{p}_2 \rangle = G(\mathbf{p}_1) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \quad (75)$$

la seconde ligne de (65) conduit à :

$$A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = G(\mathbf{p}) \quad (76)$$

A titre d'illustration, cherchons maintenant un opérateur A dont la transformée de Wigner combine position et impulsion, par exemple :

$$A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \quad (77)$$

La relation (66) nous fournit ses éléments de matrice :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1 | A | \mathbf{r}_2 \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \, e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\hbar} \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \cdot \mathbf{p} \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (78)$$

On reconnaît dans cette expression les éléments de matrice de l'opérateur \mathbf{P} , égaux au gradient d'une fonction delta des positions multiplié par \hbar/i ; d'autre part, \mathbf{r}_1 correspond à l'effet de l'opérateur position sur le bra, tandis que \mathbf{r}_2 à l'effet de l'opérateur position sur le ket. Nous avons donc :

$$A = \frac{1}{2} [\mathbf{R} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{R}] \quad (79)$$

Nous arrivons ainsi à un opérateur hermitique, comme c'est nécessaire puisque sa transformée de Wigner est réelle. Il est cependant remarquable que la construction de l'opérateur quantique à partir des transformées de Wigner introduise spontanément la mise dans l'ordre des opérateurs qui produit la symétrisation nécessaire. De façon générale, l'utilisation de la transformée de Wigner permet de construire des opérateurs symétrisés en position et impulsion à partir de fonctions classiques réelles ; elle constitue ainsi une véritable procédure de quantification.

3-c. Transformée de Wigner d'un produit d'opérateurs

En général, et comme nous allons le voir, la transformée de Wigner associée au produit de deux opérateurs A et B n'est pas simplement le produit des transformées de Wigner de chacun des opérateurs.

α. *Expression générale*

Appliquons la relation (65) pour obtenir la transformée de Wigner d'un produit d'opérateurs A et B . L'insertion d'une relation de fermeture sur les kets $|\mathbf{z}\rangle$ permet d'obtenir :

$$[AB]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int d^3y e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} \int d^3z \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2} \middle| A \middle| \mathbf{z} \right\rangle \left\langle \mathbf{z} \middle| B \middle| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2} \right\rangle \quad (80)$$

Nous pouvons alors remplacer les éléments de matrice de A et B par leurs expressions (66), ce qui conduit à :

$$\begin{aligned} & [AB]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d^3y \int d^3z e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} \int d^3p_1 \int d^3p_2 e^{i\mathbf{p}_1\cdot(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{y}}{2}-\mathbf{z})/\hbar} e^{i\mathbf{p}_2\cdot(-\mathbf{r}+\frac{\mathbf{y}}{2}+\mathbf{z})/\hbar} \\ & \quad \times A_W\left(\frac{\mathbf{r}+\mathbf{z}}{2} + \frac{\mathbf{y}}{4}, \mathbf{p}_1\right) B_W\left(\frac{\mathbf{r}+\mathbf{z}}{2} - \frac{\mathbf{y}}{4}, \mathbf{p}_2\right) \end{aligned} \quad (81)$$

Au lieu d'utiliser la représentation position, on peut utiliser la représentation impulsion, c'est-à-dire les relations des deuxièmes lignes de (65) et (66). Un raisonnement semblable au précédent conduit alors à :

$$\begin{aligned} & [AB]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \int d^3q' \int d^3x \int d^3y e^{i(\mathbf{q}'-\mathbf{p}-\frac{\mathbf{q}}{2})\cdot\mathbf{x}/\hbar} e^{i\mathbf{p}_2\cdot(\mathbf{p}-\frac{\mathbf{q}}{2}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{y}/\hbar} \\ & \quad \times A_W\left(\mathbf{x}, \frac{\mathbf{q}'+\mathbf{p}}{2} + \frac{\mathbf{q}}{4}\right) B_W\left(\mathbf{y}, \frac{\mathbf{q}'+\mathbf{p}}{2} - \frac{\mathbf{q}}{4}\right) \end{aligned} \quad (82)$$

Selon les cas, c'est la relation (81) ou (82) qui est la plus commode à utiliser. Ces deux expressions sont exactes, mais restent relativement compliquées. Elles se simplifient toutefois dans un certain nombre de cas particuliers.

 β. *Quelques cas simples*

A titre de premier exemple, supposons que l'opérateur A soit l'opérateur position \mathbf{R} et B un opérateur quelconque. Comme A_W ne dépend alors pas de p_1 , il apparaît dans (81) une intégrale sur $d^3p_1 / (2\pi\hbar)^3$ qui introduit une fonction $\delta(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2} - \mathbf{z})$, ce qui permet d'effectuer l'intégration sur d^3z et d'obtenir :

$$[\mathbf{R}B]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3y e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} \int d^3p_2 e^{i\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{y}/\hbar} \times \left[\mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2} \right] B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2) \quad (83)$$

Pour le terme en \mathbf{r} , l'intégrale sur d^3y de l'exponentielle $e^{i(\mathbf{p}_2-\mathbf{p})\cdot\mathbf{y}/\hbar}$ introduit une fonction $\mathbf{r}\delta(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p})$ avec un coefficient $(2\pi\hbar)^3$; le terme en $\mathbf{y}/2$ donne pour sa part $\nabla_{\mathbf{p}_2}\delta(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p})$, avec un coefficient $(\hbar/2i)(2\pi\hbar)^3$. Après intégration sur d^3p_2 , il vient donc :

$$[\mathbf{R}B]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \mathbf{r} B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - \frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{p}} B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (84)$$

Si maintenant nous changeons l'ordre des opérateurs \mathbf{R} et B , les rôles de \mathbf{p}_1 et \mathbf{p}_2 sont intervertis dans (81); l'intégrale sur $d^3p_2/(2\pi\hbar)^3$ introduit une fonction $\delta(-\mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2} + \mathbf{z})$ et l'intégrale sur d^3z conduit à :

$$[\mathbf{B}\mathbf{R}]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3y e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} \int d^3p_1 e^{i\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{y}/\hbar} \times B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1) \left[\mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2} \right] \quad (85)$$

Par rapport à (83), seul change le signe de \mathbf{y} dans le crochet final, de sorte que l'on obtient simplement le résultat en changeant le signe du gradient dans le second membre de (84). Ainsi, le commutateur a pour transformée de Wigner

$$[\mathbf{R}, B]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = -\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{p}} B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (86)$$

Le même raisonnement à partir de (82) conduit à :

$$[\mathbf{P}B]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \mathbf{p} B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}} B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (87)$$

Nous pouvons maintenant itérer cette relation pour obtenir :

$$[\mathbf{P}^2 B]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2 B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + 2\frac{\hbar}{i} \mathbf{p} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - \hbar^2 \Delta_{\mathbf{r}} B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (88)$$

On obtient ainsi la relation qui donne la transformée de Wigner du commutateur d'un opérateur quelconque avec le carré de l'impulsion :

$$[\mathbf{P}^2, B]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{2\hbar}{i} \mathbf{p} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (89)$$

et qui nous sera utile pour la suite.

γ. Développements en gradients

Nous montrons ci-dessous que l'expression (81) peut être développée en séries de dérivées d'ordres croissants des deux fonctions A_W et B_W sous la forme :

$$[AB]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \times B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{\hbar}{2i} \{B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}), A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})\} + \dots \quad (90)$$

où apparaît la définition classique du "crochet de Poisson" [92, 93] de la mécanique lagrangienne classique :

$$\begin{aligned} & \{B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}), A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})\} \\ &= \nabla_{\mathbf{r}} B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - \nabla_{\mathbf{r}} A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \end{aligned} \quad (91)$$

Ainsi, à l'ordre, le plus bas en \hbar , la fonction de Wigner d'un produit d'opérateurs est simplement le produit des transformées de Wigner de ces opérateurs. Au premier ordre s'y ajoute une correction qui fait intervenir le crochet de Poisson des deux transformées de Wigner. Il est remarquable que s'introduise ainsi cette définition classique à partir de considérations purement quantiques; on comprend que ces résultats soient bien adaptés à l'étude de la limite classique de la mécanique quantique.

Dans (90), le développement est limité à la contribution des dérivées du premier ordre des deux fonctions ; les termes suivants feraient intervenir des dérivées d'ordre plus élevé et seraient proportionnels à une puissance de \hbar croissante avec cet ordre (le résultat correspondant est appelé "formule de Groenewold" ; voir par exemple [88]).

Démonstration :

Effectuons dans (81) le changement suivant de variables d'intégration des impulsions :

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \frac{\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2}{2} \\ \mathbf{q} &= \mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2\end{aligned}\quad (92)$$

Ceci conduit à la nouvelle expression :

$$\begin{aligned}[AB]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d^3y \int d^3z \int d^3P \int d^3q e^{i(\mathbf{P}-\mathbf{p})\cdot\mathbf{y}/\hbar} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{z})/\hbar} \\ &\quad \times A_W\left(\frac{\mathbf{r}+\mathbf{z}}{2} + \frac{\mathbf{y}}{4}, \mathbf{P} + \frac{\mathbf{q}}{2}\right) B_W\left(\frac{\mathbf{r}+\mathbf{z}}{2} - \frac{\mathbf{y}}{4}, \mathbf{P} - \frac{\mathbf{q}}{2}\right)\end{aligned}\quad (93)$$

Si les deux transformées de Wigner A_W et B_W dépendent lentement des positions et impulsions, nous pouvons utiliser les développements :

$$\begin{aligned}A_W\left(\frac{\mathbf{r}+\mathbf{z}}{2} + \frac{\mathbf{y}}{4}, \mathbf{P} + \frac{\mathbf{q}}{2}\right) &= A_W\left(\frac{\mathbf{r}+\mathbf{z}}{2}, \mathbf{P}\right) + \frac{\mathbf{y}}{4} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} A_W + \frac{\mathbf{q}}{2} \cdot \nabla_{\mathbf{P}} A_W + \dots \\ B_W\left(\frac{\mathbf{r}+\mathbf{z}}{2} - \frac{\mathbf{y}}{4}, \mathbf{P} - \frac{\mathbf{q}}{2}\right) &= B_W\left(\frac{\mathbf{r}+\mathbf{z}}{2}, \mathbf{P}\right) - \frac{\mathbf{y}}{4} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} B_W - \frac{\mathbf{q}}{2} \cdot \nabla_{\mathbf{P}} B_W + \dots\end{aligned}\quad (94)$$

Si l'on ne retient que le premier terme de chacun de ces deux développements (terme d'ordre zéro en gradients), les intégrales sur d^3y et d^3q introduisent respectivement des fonctions $\delta(\mathbf{P} - \mathbf{p})$ et $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{z})$, chacune avec un coefficient $(2\pi\hbar)^3$; il vient alors simplement :

$$[AB]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \times B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \dots\quad (95)$$

Dans cette approximation, la transformée de Wigner du produit de deux opérateurs est donc simplement le produit des transformées de Wigner.

Prenons maintenant en compte les termes d'ordre un en gradients dans (94). Le terme en $\nabla_{\mathbf{r}} A_W$ de la première ligne contient une somme en d^3y modifiée par la présence du \mathbf{y} sous l'intégrale :

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3y e^{i(\mathbf{P}-\mathbf{p})\cdot\mathbf{y}/\hbar} \mathbf{y} = \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{P}} \delta(\mathbf{P} - \mathbf{p})\quad (96)$$

L'intégrale sur d^3P de (93) est alors modifiée et conduit maintenant à une dérivation par rapport à \mathbf{P} de la fonction à intégrer, une multiplication par le coefficient $-\hbar/i$, et enfin le remplacement de \mathbf{P} par \mathbf{p} . En revanche, l'intégrale sur $d^3q/(2\pi)^3$ n'est pas modifiée, et conduit à remplacer z par \mathbf{r} . Le terme correspondant s'écrit donc :

$$-\frac{\hbar}{4i} \nabla_{\mathbf{p}} \cdot [B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{r}} A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})]\quad (97)$$

Quant au terme en $\nabla_{\mathbf{P}} A_W$ de la première ligne, il se traite de la même façon. Cette fois, la présence de la variable \mathbf{q} transforme $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{z})$ en $\nabla_{\mathbf{z}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{z})$, avec un

coefficient $-\hbar/i$, où le changement de signe de ce coefficient provient du $-\mathbf{z}$ dans l'exposant $\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{z})$; l'intégrale sur d^3P n'est pas modifiée. Le résultat est le terme :

$$\frac{\hbar}{4i} \nabla_{\mathbf{r}} \cdot [B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{p}} A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})] \quad (98)$$

qui, ajouté à (97), conduit à la contribution (les termes de double dérivation de A_W s'éliminent) :

$$\frac{\hbar}{4i} [\nabla_{\mathbf{r}} B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - \nabla_{\mathbf{r}} A_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} B_W(\mathbf{r}, \mathbf{p})] \quad (99)$$

Enfin, les termes provenant de la second ligne de (94) sont obtenus en échangeant les rôles de A_W et de B_W , et en changeant le signe du fait des valeurs opposées de \mathbf{y} et \mathbf{q} dans les deux lignes de (94). On double ainsi le résultat (99), et l'on obtient pour finir l'expression (90) au premier ordre en gradients.

3-d. Evolution de l'opérateur densité

L'évolution de Schrödinger de l'opérateur densité est régie par l'équation de von Neumann :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = [H(t), \rho(t)] \quad (100)$$

Par transformation de Wigner, cette équation devient :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} [H, \rho]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) \quad (101)$$

où, au second membre, figure la transformée de Wigner associée au commutateur de $H(t)$ et $\rho(t)$; le facteur $1/(2\pi\hbar)^3$ provient de celui qui apparaît dans la distribution de Wigner de l'opérateur densité, mais pas dans celle de la transformée d'un opérateur quelconque. Nous avons vu que l'expression générale de la transformée de Wigner d'un produit d'opérateurs est compliquée; il en est de même de celle de leur commutateur.

α. Limite classique

Si toutefois nous nous limitons comme en (90) au premier ordre en gradients, nous constatons que les termes d'ordre zéro en gradients disparaissent, et que les termes en $H(t)\rho(t)$ et $\rho(t)H(t)$ se doublent; enfin les facteurs \hbar des deux membres se simplifient. Dans le cadre de cette approximation, on obtient donc :

$$\frac{d}{dt} \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \{H_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1; t), \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1; t)\} + \hbar... \quad (102)$$

où le crochet de Poisson de $H_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1; t)$ et de $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1; t)$ est défini en (91); comme nous l'avons noté au § 3-c-γ, les termes négligés sont proportionnels à \hbar , et disparaissent donc à la limite classique $\hbar \rightarrow 0$. Nous retrouvons ainsi les équations habituelles de la dynamique classique comme limite des équations de la dynamique quantique lorsque les gradients des transformées de Wigner par rapport aux positions et aux impulsions sont faibles.

β . *Particule dans un potentiel extérieur*

On peut effectuer un calcul exact si l'on prend pour l'hamiltonien de la particule la somme d'une énergie cinétique et d'une énergie potentielle externe :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R}; t) \quad (103)$$

où m est la masse de la particule. La contribution de l'énergie cinétique au second membre de (101) découle immédiatement de la relation (89) :

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{\text{cinétique}} \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = -\frac{\mathbf{P}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) \quad (104)$$

L'évolution de la distribution de Wigner induite par l'opérateur d'énergie cinétique est donnée par un terme d'entraînement (souvent désigné par les mots anglais "drift term") qui est identique à celui de la physique classique.

Pour la contribution de l'énergie potentielle, le calcul est très semblable à celui qui a été mené au début du § 3-c- β , à ceci près qu'il s'agit maintenant d'une fonction $V(\mathbf{R})$ de l'opérateur \mathbf{R} , au lieu de cet opérateur lui-même. Les relations (83) et (85) deviennent alors, lorsque $B = \rho$:

$$\begin{aligned} [V(\mathbf{R})\rho]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3y e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} \int d^3p_2 e^{i\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{y}} \times V\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2}; t\right) \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2; t) \end{aligned} \quad (105)$$

et :

$$\begin{aligned} [\rho V(\mathbf{R})]_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3y e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} \int d^3p_1 e^{i\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{y}} \times \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}_1; t) V\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2}; t\right) \end{aligned} \quad (106)$$

Ainsi, l'évolution de la distribution de Wigner $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ obéit à l'équation :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) + \frac{\mathbf{P}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3y \int d^3p' e^{i(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\cdot\mathbf{y}/\hbar} \\ \times \left[V\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2}; t\right) - V\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2}; t\right) \right] \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}'; t) \end{aligned} \quad (107)$$

Cette équation est exacte; elle contient donc tous les effets quantiques intervenant dans l'évolution de la particule. Elle obéit à une loi de conservation locale de la probabilité :

$$\frac{d}{dt} n(\mathbf{r}, t) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (108)$$

où la densité locale de probabilité $n(\mathbf{r}, t)$ est définie en (18), et où le courant associé $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ est défini par :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \int d^3p \frac{\mathbf{P}}{m} \rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) \quad (109)$$

En effet, si l'on intègre (107) sur d^3p , le membre de gauche conduit immédiatement à celui de (108), comme en mécanique classique ; pour le membre de droite, l'intégration sur d^3p' introduit une fonction $\delta(\mathbf{y})$ qui annule le crochet dans l'intégrale restante.

Lorsque le potentiel extérieur varie suffisamment lentement, on peut dans (107) effectuer la substitution :

$$V\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2}; t\right) - V\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2}; t\right) = \mathbf{y} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}; t) + \dots \quad (110)$$

L'intégration sur $d^3y/(2\pi\hbar)^3$ conduit alors à une fonction $(\hbar/i)\nabla_{\mathbf{p}}\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$ et il vient :

$$\frac{d}{dt}\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}}\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \nabla_{\mathbf{r}}V(\mathbf{r}; t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}}\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) + \dots \quad (111)$$

On reconnaît alors l'équation de Liouville de la mécanique classique. Les points qui figurent à la fin de cette équation symbolisent les contributions éventuelles des termes contenant des dérivées spatiales d'ordre supérieur du potentiel $V(\mathbf{r}; t)$; ils contiennent également une puissance de \hbar croissant avec l'ordre de la dérivée. Il s'agit donc de corrections quantiques : plus le potentiel varie rapidement dans l'espace, plus est grand le nombre de termes à prendre en compte. En revanche, pour un potentiel variant lentement, se limiter au terme d'évolution classique fournit une bonne approximation.

4. Généralisations

Les considérations qui précèdent se généralisent directement à des particules à spin, ou à un système de N particules.

4-a. Prise en compte du spin

Pour une particule munie de spin, une base de l'espace des états est constituée des kets $|\mathbf{r}, \nu\rangle$, où \mathbf{r} est la valeur propre de l'opérateur position et ν celle de la composante du spin sur l'axe de quantification. Les éléments de matrice de l'opérateur densité s'écrivent alors :

$$\langle \mathbf{r}, \nu | \rho | \mathbf{r}', \nu' \rangle \quad (112)$$

Pour chaque valeur de ν et ν' , on peut effectuer une transformation de Wigner ; on définit alors comme en (17) les fonctions :

$$\rho_W^{\nu\nu'}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3y e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2}, \nu \middle| \rho(t) \middle| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2}, \nu' \right\rangle \quad (113)$$

Pour un spin 1/2 par exemple, les deux indices ν et ν' prennent deux valeurs notées \pm . On définit alors quatre fonctions de Wigner, que l'on peut ranger dans une matrice de spin 2×2 :

$$\begin{pmatrix} \rho_W^{++}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) & \rho_W^{+-}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) \\ \rho_W^{-+}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) & \rho_W^{--}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) \end{pmatrix} \quad (114)$$

On vérifie aisément l'hermiticité de cette matrice :

$$[\rho_W^{+-}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)]^* = \rho_W^{-+}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) \quad (115)$$

Une telle matrice est d'usage fréquent dans l'étude des propriétés quantiques de transport de la polarisation de spin dans des fluides (ondes de spin par exemple).

4-b. Plusieurs particules

Pour deux particules sans spin, la relation (17) se généralise immédiatement en :

$$\begin{aligned} \rho_W(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2; t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d^3y_1 \int d^3y_2 e^{-i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{y}_1/\hbar} e^{-i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{y}_2/\hbar} \\ &\times \left\langle \mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{y}_1}{2}, \mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{y}_2}{2} \left| \rho(t) \right| \mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{y}_1}{2}, \mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{y}_2}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (116)$$

et l'on peut traiter de la même manière un nombre quelconque de particules. Le spin se traite de la même façon que ci-dessus, mais cela conduit rapidement à un très grand nombre de fonctions de Wigner (4^N pour N particules de spin $1/2$).

La distribution de Wigner d'un système dépendant d'un grand nombre N de particules dépend donc de $6N$ variables quand ces particules n'ont pas de spin ; si les particules ont un spin $1/2$, ce n'est pas une seule distribution qu'il faut étudier, mais 2^{2N} distributions qui constituent les éléments de matrice d'un opérateur de spins. En pratique, on raisonnera donc la plupart du temps plutôt sur la distribution de Wigner de l'opérateur densité réduit à une seule particule, obtenu par trace partielle sur les $N - 1$ autres, ou parfois sur l'opérateur densité réduit à deux particules.

5. Discussion physique, distribution de Wigner et effets quantiques

La connaissance de la distribution de Wigner permet de calculer la valeur moyenne des observables, comme nous l'avons vu avec la relation (69). Elle permet donc d'obtenir la probabilité de n'importe quel résultat de mesure, puisque cette probabilité n'est autre que la valeur moyenne du projecteur sur le sous-espace propre associé à ce résultat : il suffit donc de calculer la transformée de Wigner de ce projecteur, de la multiplier par $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$, et d'intégrer sur les deux variables. D'un point de vue pratique, toute l'information est donc contenue dans $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$. Mais, comme nous l'avons déjà souligné avec les exemples du § 2-f, ce n'est pas pour autant qu'il faut attribuer trop de contenu physique à la distribution de Wigner elle-même. En toute rigueur, la distribution de Wigner apparaît donc plutôt comme un outil de calcul puissant et commode que comme une représentation directe des propriétés physiques du système.

Une façon de mieux voir quel est le comportement de la transformée de Wigner dans une situation où les effets quantiques dominent est d'étudier une expérience d'interférence. C'est ce que nous faisons maintenant.

5-a. Une expérience d'interférences

Lorsque la fonction d'onde d'une particule traverse un écran percé de deux orifices, cette fonction d'onde donne naissance à deux paquets d'ondes cohérents

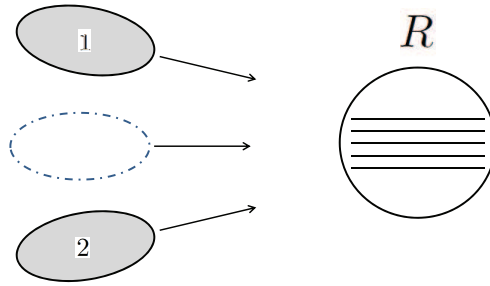


FIGURE 1 – La fonction d’onde d’une particule quantique est séparée en deux composantes cohérentes 1 et 2, par exemple après son passage à travers un écran percé de deux trous, ou dans un interféromètre. Tant que les deux paquets d’ondes sont distincts dans l’espace, la distribution de Wigner est la somme de trois composantes : une composante localisée avec le paquet d’ondes 1, une autre avec le paquet d’ondes 2, et enfin une troisième (représentée en tiretés sur la figure) qui se propage à mi-distance entre les deux paquets d’ondes. Cette troisième composante est appelée “composante fantôme” car, lors d’une mesure de la position de la particule, celle-ci ne peut jamais y être trouvée (la troisième composante est donc vide de particule). La valeur de la distribution de Wigner fantôme oscille rapidement en fonction de l’impulsion \mathbf{p} .

Plus tard, lorsque les deux paquets d’ondes 1 et 2 se croisent, les trois composantes deviennent alors non nulles dans la même région de l’espace ; de plus, les oscillations en impulsion de la composante fantôme sont lentes ou disparaissent. Cette composante joue alors un rôle essentiel : c’est elle qui, en s’ajoutant aux termes 1 et 2, vient introduire les oscillations de densité qui créent des franges claires et sombres (schématisées par des traits horizontaux dans la région R). Son rôle, qui reste virtuel tant que les paquets d’ondes sont éloignés, devient donc essentiel dès qu’ils se recouvrent, puisque c’est elle qui introduit les effets quantiques d’interférence.

qui se propagent dans l’espace, et interfèrent quand ils se recouvrent. La Figure 1 représente ces deux paquets d’ondes après l’écran, qui tous deux se dirigent vers la région R où ils vont interférer. Comme ils se propagent dans l’espace libre, la distribution de Wigner associée à la particule obéit simplement à la relation (104), qui est identique à une équation d’évolution classique. Dans ces conditions, d’où peuvent donc venir les effets d’interférence dans la région R ? Pour répondre à cette question, nous allons utiliser la relation (19), ou son équivalente (26), qui permettent de calculer la transformée de Wigner associée à la fonction d’onde de la particule.

La fonction d’onde est alors la somme de deux composantes, $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ pour le paquet d’ondes issu du premier trou dans l’écran, $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ pour celui issu du second trou :

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_1(\mathbf{r}, t) + \Psi_2(\mathbf{r}, t) \quad (117)$$

La relation (19) est quadratique en Ψ ; lorsqu’on y insère (117), quatre contributions

apparaissent :

$$\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \rho_W^1(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) + \rho_W^2(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) + \rho_W^{1,2}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) + \rho_W^{2,1}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) \quad (118)$$

Dans cette égalité, $\rho_W^1(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ est obtenu en remplaçant dans (19) les fonctions $\Psi(\mathbf{r}, t)$ et $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ par $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ et $\Psi_1^*(\mathbf{r}, t)$ respectivement ; la contribution $\rho_W^2(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ est obtenue en les remplaçant par $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ et $\Psi_2^*(\mathbf{r}, t)$ respectivement ; enfin, les contributions “croisées” $\rho_W^{1,2}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ et $\rho_W^{2,1}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ proviennent du remplacement de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ par $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ et de $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ par $\Psi_2^*(\mathbf{r}, t)$, et inversement. Ainsi, par exemple, la relation (19) conduit à :

$$\rho_W^{1,2}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3y e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar} \Psi_1\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{y}}{2}; t\right) \Psi_2^*\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{y}}{2}; t\right) \quad (119)$$

tandis que la relation équivalente (26) fournit une autre expression de cette même fonction en fonction des transformées de Fourier $\bar{\Psi}_1$ et $\bar{\Psi}_2^*$. On vérifie sans difficulté que les deux distributions $\rho_W^{1,2}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ et $\rho_W^{2,1}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ sont complexes conjuguées l’une de l’autre ; leur somme est donc réelle, ce qui assure que $\rho_W(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ l’est également.

A titre d’exemple, supposons que chacun des deux paquets d’ondes est gaussien, comme celui étudié au § 2-d. Nous avons vu au Complément G_I que, lors de sa propagation dans l’espace libre, un paquet d’onde initialement gaussien en reste à tout instant ; sa largeur en impulsion reste constante, mais sa largeur en position varie dans le temps. Pour simplifier l’écriture, nous étudions donc le problème à une seule dimension sans écrire explicitement la dépendance en temps ; nous supposons que l’un des paquets d’onde est centré en $+x_0$, l’autre en $-x_0$. La relation (41) permet alors d’écrire :

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_1(p_x) &= \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \sqrt{\frac{a}{2\hbar}} e^{-a^2(p_x - p_0)^2/4\hbar^2} e^{-ip_x x_0/\hbar} \\ \bar{\psi}_2(p_x) &= \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \sqrt{\frac{a}{2\hbar}} e^{-a^2(p_x - p_0)^2/4\hbar^2} e^{ip_x x_0/\hbar} \end{aligned} \quad (120)$$

(le facteur $1/\sqrt{2}$ que nous avons ajouté a pour but d’assurer la normalisation de la fonction d’onde totale ; nous supposons que $a \ll x_0$, c’est-à-dire que le recouvrement spatial des deux paquets d’onde est négligeable, de sorte que la norme de la somme est la somme des normes). Le même calcul qu’au § 2-d fournit alors :

$$\begin{aligned} \rho_W^1(x, p_x; t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p_x - p_0)^2} e^{-2\frac{(x - x_0)^2}{a^2}} \\ \rho_W^2(x, p_x; t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p_x - p_0)^2} e^{-2\frac{(x + x_0)^2}{a^2}} \end{aligned} \quad (121)$$

Pour les contributions croisées, il faut faire un calcul légèrement différent. Le changement de signe de x_0 entre les deux lignes de (120) a pour conséquence que le produit $\bar{\psi}_1(p_x + q/2)\bar{\psi}_2^*(p_x - q/2)$ contient l’exponentielle $e^{-2ip_x x_0/\hbar}$, tandis que le

produit $\bar{\psi}_1^*(p_x + q/2)\bar{\psi}_2(p_x - q/2)$ contient $e^{2ipx_0/\hbar}$. Le calcul de (42) devient alors :

$$\begin{aligned} & \rho_W^{1,2}(x, p_x) + \rho_W^{2,1}(x, p_x) \\ &= \frac{1}{2} \frac{a}{(2\pi)^{3/2} \hbar^2} \int dq e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2} \left[(p-p_0 + \frac{q}{2})^2 + (p-p_0 - \frac{q}{2})^2 \right]} e^{iqx/\hbar} \left[e^{-2ipx_0/\hbar} + e^{2ipx_0/\hbar} \right] \\ &= \frac{a}{(2\pi)^{3/2} \hbar^2} \cos \frac{2px_0}{\hbar} e^{-\frac{a^2}{2\hbar^2} (p-p_0)^2} \int dq e^{-\frac{a^2 q^2}{8\hbar^2}} e^{i \frac{qx}{\hbar}} \end{aligned} \quad (122)$$

soit :

$$\rho_W^{1,2}(x, p_x) + \rho_W^{2,1}(x, p_x) = \cos \frac{2px_0}{\hbar} e^{-\frac{a^2}{2\hbar^2} (p-p_0)^2} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} \quad (123)$$

Pour finir, la transformée de Wigner totale est :

$$\rho_W(x, p_x) = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{a^2}{2\hbar^2} (p_x - p_0)^2} \left[e^{-2\frac{(x-x_0)^2}{a^2}} + e^{-2\frac{(x+x_0)^2}{a^2}} + 2 \cos \frac{2p_x x_0}{\hbar} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} \right] \quad (124)$$

Les deux premiers termes dans le crochet se comprennent immédiatement : ce sont simplement la demi-somme des transformées de Wigner associées à chacun des paquets d'ondes. Chacun de ces deux termes est centré sur le paquet d'onde auquel il correspond, soit en $x = \pm x_0$. Le troisième terme est le terme croisé, qui correspond à un terme d'interférence entre les deux paquets d'ondes. Il est centré en $x = 0$, donc à mi-chemin entre eux, et de plus oscille en fonction de l'impulsion p_x à une fréquence proportionnelle à la distance entre les deux paquets d'ondes.

5-b. Discussion générale ; composante "fantôme"

La distribution $\rho_W^1(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ se propage comme celle d'une particule libre qui serait décrite par le seul paquet d'ondes $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$; la distribution $\rho_W^2(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$ est celle associée au second paquet d'ondes, lui aussi considéré comme isolé. Si ces contributions étaient les seules, lorsque ces deux paquets d'ondes se croisent les deux distributions de Wigner s'ajouteraient simplement, puisque leur évolution est classique; aucun effet d'interférence quantique ne résulterait de cette addition.

Mais, dans (118), comme nous l'avons vu, il faut également tenir compte des termes croisés (termes d'interférence), dont les propriétés sont bien différentes de celles des deux termes qui la précèdent. Une première différence notable est bien sûr leur caractère oscillant en fonction de l'impulsion, qui fait nécessairement apparaître des valeurs positives et négatives de la distribution; il s'agit d'un effet purement quantique, puisqu'une distribution classique doit toujours rester positive ou nulle. Une autre différence est que ce terme croisé de la transformée de Wigner se propage dans une région de l'espace où la fonction d'onde est nulle, et ne peut donc correspondre à aucune probabilité de présence de la particule (l'intégrale sur l'impulsion de la distribution correspondante est nulle). On vérifie d'ailleurs que l'intégrale sur l'impulsion du dernier terme du second membre de (124) est nulle (dans la limite $x_0 \gg a$ des paquets d'onde bien séparés où nous avons effectué notre calcul). La somme $\rho_W^{1,2}(x, p_x) + \rho_W^{2,1}(x, p_x)$ est parfois appelée "composante fantôme" de la distribution de Wigner (ou parfois encore en optique quantique "composante

tamasic”); lors d’une mesure de la position de la particule, elle ne peut en effet jamais être trouvée dans cette composante⁴. Sa valeur est toujours réelle, mais pas nécessairement positive du fait de ses oscillations.

Ainsi, tant que les deux paquets d’ondes 1 et 2 restent éloignés, la transformée de Wigner associés à la particule est la somme de trois composantes indépendantes : deux composantes associées séparément à chacun des paquets d’ondes et se propageant avec eux ; une “composante fantôme” se propageant à mi-distance entre les paquets d’onde. Cependant, lorsqu’ensuite les paquets d’ondes se croisent dans la région R , les trois composantes de la transformée de Wigner se recouvrent dans l’espace. La composante fantôme de signe variable se combine alors avec les deux composantes précédentes pour moduler la probabilité de présence de la particule, et produire les franges d’interférences prédites par la mécanique quantique. C’est donc elle qui, en quelque sorte, transporte les effets quantiques associés à la particule.

Conclusion

La mécanique quantique est une théorie très différente de la mécanique classique. Il n’était donc pas du tout évident que, grâce à l’utilisation des transformées de Wigner, il devienne possible de mettre les équations quantiques sous une forme qui ressemble à ce point à celle des équations classiques d’une distribution dans l’espace des phases. De plus, comme nous l’avons vu, n’importe quelle fonction classique réelle de la position et de l’impulsion engendre dans ce formalisme un opérateur hermitique agissant dans l’espace des états. A la limite où $\hbar \rightarrow 0$, les équations quantiques d’évolution font apparaître les mêmes crochets de Poisson que les équations classiques. Les similarités entre théories quantique et classique apparaissent alors comme très marquées. Les effets quantiques se manifestent toutefois de plusieurs manières :

- l’évolution de la distribution de Wigner peut être notablement différente de l’évolution classique si les potentiels varient rapidement sur une longueur de l’ordre de \hbar/p (longueur d’onde de de Broglie), car les termes d’ordre élevés en gradients deviennent alors essentiels ;
- la transformée de Wigner n’est pas toujours positive. Nous avons vu l’exemple de la composante fantôme dans une expérience d’interférence, qui en quelque sorte transporte les effets quantiques jusqu’aux composantes habituelles ;
- alors que toute distribution dans l’espace des phases, pourvu qu’elle soit positive et normée, est a priori acceptable en physique classique, ce n’est pas le cas en mécanique quantique : seules sont acceptables les distributions de Wigner qui correspondent à un opérateur densité défini positif, condition qui ne s’exprime pas simplement en termes de la distribution.

La transformée de Wigner est souvent utilisée en physique quantique. Nous avons déjà signalé qu’elle a été introduite en 1932 dans le cadre de l’étude des propriétés corrections quantiques à l’équilibre thermique [87]. Elle joue cependant un rôle probablement encore plus important dans l’étude des propriétés de transport grâce à une équation du type équation de Boltzmann, puisque par essence même une telle équation contient des informations simultanées sur les positions et les impulsions des particules. De plus, la transformée de Wigner est également utile pour

4. On parle aussi parfois de “composante vide” pour exprimer l’idée que cette composante est vide de particule.

la compréhension et la caractérisation générale des effets quantiques, sa négativité dans certaines régions de l'espace des phases étant un indicateur précieux de l'existence de tels effets. On peut même utiliser la transformée de Wigner pour introduire un "formalisme de la mécanique quantique dans l'espace des phases" [89, 90], qui est totalement équivalent au formalisme habituel en termes d'espace des états et d'opérateurs et constitue donc une véritable procédure de quantification. De façon très générale, la transformée de Wigner appartient à la classe des formulations dites de Liouville de la mécanique quantique [94], dont les usages sont nombreux.

Enfin, dans de nombreux domaines de la physique (en particulier le traitement du signal), la transformée de Wigner entre dans la catégorie plus large des transformées mixtes temps-fréquence. Il existe de nombreux types de telles transformées (transformées à fenêtre glissante ou à enveloppes, ondelettes, etc.) qui, selon les cas, sont les mieux adaptées au problème traité. En mécanique quantique également, il existe d'autres transformées quasi classiques que celle de Wigner, comme la transformée de Husimi ou de Kirkwood, ou celle de Glauber qui s'exprime en termes d'opérateurs de création ou d'annihilation du champ électromagnétique ; pour une revue, le lecteur pourra consulter la référence [88]. La transformée de Wigner reste toutefois l'une des transformées les plus commodes, en particulier du fait des calculs analytiques qu'elle permet dans bien des cas intéressants.

Bibliographie

- [1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique quantique, Tome I*, Hermann (1977).
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique quantique, Tome II*, Hermann (1977).
- [3] R.K. Pathria, *Statistical mechanics*, Pergamon press (1972).
- [4] E.J. Mueller, Tin-Lun Ho, M. Ueda and G. Baym, “Fragmentation of Bose-Einstein condensates”, *Phys. Rev. A* **74**, 033612 (2006).
- [5] J.P. Blaizot et G. Ripka, *Quantum theory of finite systems*, the MIT Press (1986).
- [6] Wikipédia, rubrique “Théorie de la fonctionnelle de la densité”, https://fr.wikipedia.org/wiki/Théorie_de_la_fonctionnelle_de_la_densité
- [7] L.P. Kadanoff et G. Baym, *Quantum statistical mechanics*, Benjamin (1976).
- [8] A.J. Leggett, *Quantum liquids*, Oxford University Press, 2006.
- [9] J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer, “Theory of superconductivity”, *Phys. Rev.* **108**, 1175-1204 (1957).
- [10] W. Ketterle and M. Zwierlein, “Making, probing and understanding ultracold Fermi gases” in *Proceedings of the international school of physics Enrico Fermi, Course CLXIV, Varenna*, édité par M. Inguscio, W. Ketterle et C. Salomon, IOS Press (Amsterdam), 2008 ; arXiv :0801.2500v1.
- [11] W. Zwerger, “The BCS-BEC crossover and the unitary Fermi gas”, Springer, 2012.
- [12] M. Tinkham, “Introduction to superconductivity”, Dover books on physics, 2004.
- [13] R.D. Parks, “Superconductivity”, Volume 1 and 2, Dekker, 1969.
- [14] M. Combescot and S.Y. Shiau, “Excitons and Cooper pairs” Oxford University Press, 2016.
- [15] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc and G. Grynberg, *Photons et atomes, introduction à l'électrodynamique Quantique*, InterEditions et Editions du CNRS, Paris (1987).
- [16] T.A. Welton, “Some observable effects of the quantum-mechanical fluctuations of the electromagnetic field”, *Phys. Rev.* **74**, 1157-1167 (1948).
- [17] J.V. Prodan, W. D. Phillips and H. Metcalf, “Laser production of a very slow monoenergetic atomic beam”, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1149-1153 (1982).
- [18] T.W. Hänsch and A. Schawlow, “Cooling of gases by laser radiation” *Opt. Comm.* **13**, 68-69 (1975).
- [19] D.J. Wineland and H. Dehmelt, “Proposed $10^{14}\delta\nu < \nu$ laser fluorescence spectroscopy on Tl^+ mono-ion oscillator III (sideband cooling)”, *Bull. Am. Phys. Soc.* **20**, 637 (1975).
- [20] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et G. Grynberg, *Processus d'interaction entre photons et atomes*, InterEditions et Editions du CNRS, Paris (1988).
- [21] Special issue on laser cooling and trapping, *JOSA B, Optical Physics*, **6**, Number 11 (1989).

- [22] W. Ketterle and N.L Van Druten, “Evaporative cooling of trapped atoms”, *Advances in atomic, molecular, and optical physics*, **37**, 181-236 (1996).
- [23] C. Cohen-Tannoudji and D. Guéry-Odelin, *Advances in atomic physics. An overview*, World Scientific, Singapour (2011); *Avancées en physique atomique. Du pompage optique aux gaz quantiques*, Hermann (2016).
- [24] W.E. Lamb, “Capture of neutrons by atoms in a crystal”, *Phys. Rev.* **55**, 190-197 (1939).
- [25] L.S. Vasilenko, V. P. Chebotayev and A. V. Shishaev, “Line shape of two-photon absorption in a standing-wave field in a gas”, *JETP Lett.* **12**, 113-116 (1970).
- [26] B. Cagnac, G. Grynberg and F. Biraben, “Spectroscopie d’absorption multiphotonique sans effet Doppler”, *J. Phys. (Paris)* **34**, 845-858 (1973).
- [27] T.W. Hänsch, “Passion for precision”, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 1297-1309 (2006).
- [28] A. Kastler, “Projet d’expérience sur le moment cinétique de la lumière”, Société des Sciences physiques et naturelles de Bordeaux, Jan. 28 (1932).
- [29] R.A. Beth, “Mechanical detection and measurement of the angular momentum of light”, *Phys. Rev.* **50**, 115-125 (1936).
- [30] J.W. Simmons and M.J. Guttman, *States, waves and photons : a modern introduction to light*, Addison-Wesley (1970), Chapitre 9.
- [31] A.M. Yao and M. J. Padgett, “Orbital angular momentum : origins, behavior and applications”, *Advances in optics and photonics*, IOP Publishing **3**, 161-204 (2011).
- [32] J.D. Jackson, *Classical electrodynamics, 3rd ed.*, Wiley (1999).
- [33] J. Brossel et A. Kastler, “La détection de la résonance magnétique des niveaux excités”, *C. R. Acad. Sci.* **229**, 1213 (1949).
- [34] J. Brossel, and F. Bitter, “A new ‘Double resonance’ method for investigating atomic energy levels. Application to Hg 3P_1 ”, *Phys. Rev.* **86**, 308 (1952).
- [35] J.N. Dodd, W. N. Fox, G. W. Series and M. J. Taylor, “Light beats as indicators of structure of atomic energy levels”, *Proc. Phys. Soc.* **74**, 789 (1959).
- [36] E. Majorana, “Atomi orientati in campo magnetico variabile”, *Nuovo Cimento* **9**, 43-50 (1932).
- [37] A. Kastler, “Quelques suggestions concernant la production optique et la détection optique d’une inégalité de population des niveaux de quantification spatiale des atomes. Application à l’expérience de Stern et Gerlach et à la résonance magnétique”, *J. Phys. Radium* **11**, 255-265 (1950).
- [38] N. F. Ramsey, *Molecular beams*, Oxford University Press (1956).
- [39] L. Allen, S.M. Barnett and M.J. Padgett, *Optical angular momentum*, IOP Publishing (2003).
- [40] M.F. Andersen, C. Ryu, P. Cladé, V. Natarajan, A. Vaziri, K. Helmerson, and W.D. Phillips, “Quantized rotation of atoms from photons with orbital angular momentum” *Phys. Rev. Lett.* **97**, 170406 (2006).
- [41] A. Einstein, “Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt”, *Annalen der Physik* **17**, 132-149 (1905).

- [42] R.A. Millikan, "On the elementary electric charge and the Avogadro constant", *Physical Review* **2**, 109-143 (1913).
- [43] W.E. Lamb and M.O. Scully, "The photoelectric effect without photons", in *Polarisation, matière et rayonnement*, Volume en l'honneur d'Alfred Kastler (Presses Universitaires de France), p. 363 (1969).
- [44] E. Hanbury Brown and R.Q. Twiss, "A test of a new type of stellar interferometer on Sirius", *Nature*, **178**, 1046-1048 (1956).
- [45] P. Grangier, G. Roger and A. Aspect, "Experimental evidence for a photon anti-correlation effect on a beam splitter : a new light on single-photon interferences", *Europhys. Lett.* **1**, 173-179 (1986).
- [46] J.T. Höffges, H.W. Baldauf, W. Lange and H. Walther "Heterodyne measurements of the resonance fluorescence of a single ion", *J. of Mod. Optics* **44**, 1999-2010 (1997).
- [47] H.J. Kimble, M. Dagenais and L. Mandel, "Photon antibunching in resonance fluorescence", *Phys. Rev. Lett.* **39**, 691 (1977).
- [48] S. Pancharatnam, "Light shifts in semiclassical dispersion theory", *J. Opt. Soc. Am.* **56**, 1636 (1966).
- [49] C. Cohen-Tannoudji, "Théorie quantique du cycle de pompage optique. Vérification expérimentale des nouveaux effets prévus", *Ann. Phys.* **7**, 423-495 (1962).
- [50] C. Cohen-Tannoudji and J. Dupont-Roc, "Experimental study of light shifts in weak magnetic fields", *Phys. Rev. A* **5**, 968-984 (1972).
- [51] C. Cohen-Tannoudji, "Observation d'un déplacement de raie de résonance magnétique causé par l'excitation optique", *C. R. Acad. Sci.* **252**, 394-396 (1961).
- [52] B.R. Mollow, "Power spectrum of light scattered by two-level systems", *Phys. Rev.* **188**, 1969-1975 (1969).
- [53] S.H. Autler and C. H. Townes, "Stark effect in rapidly varying fields", *Phys. Rev.* **100**, 703-722 (1955).
- [54] S. Chu, J. Bjorkholm, A. Ashkin, and A. Cable, "Experimental observation of optically trapped atoms", *Phys. Rev. Lett.* **57**, 314-317 (1986).
- [55] R.J. Cook and R.K. Hill, "An electromagnetic mirror for neutral atoms", *Opt. Commun.* **43**, 258-260 (1982).
- [56] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T.W. Hänsch and I. Bloch, *Nature* **415**, "Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms", 39-44 (2002).
- [57] M. Ben Dahan, E. Peik, J. Reichel, Y. Castin and C. Salomon, "Bloch oscillations of atoms in an optical potential", *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4508-4511 (1996).
- [58] P.D. Lett, R.N. Watts, C.I. Westbrook, W.D. Phillips, P.L. Gould and H.J. Metcalf, "Observation of atoms laser cooled below the Doppler limit", *Phys. Rev. Lett.* **61**, 169-172 (1988).
- [59] J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, "Laser cooling below the Doppler limit by polarization gradients : simple theoretical models", *J. Opt. Soc. Am. B* **6**, 2023-2045 (1989).
- [60] P.J. Ungar, D.S. Weiss, E. Riis and S. Chu, "Optical molasses and multilevel atoms : theory", *J. Opt. Soc. Am. B* **6**, 2058-2071 (1989).

- [61] C. Salomon, J. Dalibard, W.D. Phillips, A. Clairon and S. Guellati, *Europhys. Lett.*, “Laser cooling of Cesium atoms below $3 \mu\text{K}$ ”, **12**, 683-688 (1990).
- [62] S. Gleyzes, S. Kuhr, C. Guerlin, J. Bernu, S. Deléglise, U.B. Hoff, M. Brune, J-M. Raimond and S. Haroche, “Quantum jumps of light recording the birth and death of a photon in a cavity”, *Nature* **446**, 297-300 (2007).
- [63] A. Aspect, C. Fabre et G. Grynberg, *Introduction au lasers et à l’optique quantique*, Editions Ellipses (1998) ; *Introduction to quantum optics*, Cambridge University Press (2010).
- [64] D.F. Walls and G.J. Milburn, *Quantum optics*, Springer (1994).
- [65] F. Laloë, *Comprenons-nous vraiment la mécanique quantique ?*, EDP Sciences/CNRS Editions (2011) ; *Do we really understand quantum mechanics ?*, Cambridge University Press (2012).
- [66] D. Mermin, *Quantum computer science*, Cambridge University Press (2007).
- [67] N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel and H. Zbinden, “Quantum cryptography”, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 145-195 (2002).
- [68] Une liste de références décrivant des expériences de Bell peut être trouvée dans : A. Aspect, “Closing the door on Einstein and Bohr’s quantum debate”, *Physics* **8**, 123 (2015).
- [69] V. Coffman, J. Kundu and W.K. Wootters, “Distributed entanglement”, *Phys. Rev. A* **61**, 052306 (2000).
- [70] R.F. Werner, “Quantum states with Einstein-Podolsky-Rosen correlations admitting a hidden variable model”, *Phys. Rev. A* **40**, 4277-4281 (1989).
- [71] A. Peres, “Separability criterion for density matrices”, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1413-1415 (1996).
- [72] D.M. Greenberger, M.A. Horne and A. Zeilinger, “Going beyond Bell’s theorem”, pp. 69-72 in *Bell’s theorem, quantum theory and conceptions of the Universe*, M. Kafatos (ed.), Kluwer Academic Publishers (1989).
- [73] D.M. Greenberger, M.A. Horne, A. Shimony, and A. Zeilinger, “Bell’s theorem without inequalities”, *Am. J. Phys.* **58**, 1131-1143 (1990).
- [74] D. Bouwmeester, J.W. Pan, M. Daniell, H. Weinfurter, and A. Zeilinger, “Observation of three-photon Greenberger-Horne-Zeilinger entanglement”, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1345-1349 (1999).
- [75] voir par exemple le § 5.A.2 (version française) ou 5.1.2 (version anglaise) de [65].
- [76] J.W. Pan, D. Bouwmeester, H. Weinfurter, and A. Zeilinger, “Experimental entanglement swapping : entangling photons that never interacted”, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3891-3894 (1998).
- [77] B. Hensen, H. Bernien, A.E. Dréau, A. Reiserer, N. Kalb, M.S. Blok, J. Ruitenberg, R.F. Vermeulen, R.N. Schouten, C. Abellan, W. Amaya, V. Pruneri, M.W. Mitchell, M. Markham, D.J. Twitchen, D. Elkouss, S. Wehner, T.H. Taminiau and R. Hanson, “Experimental loophole-free violation of a Bell inequality using electron spins separated by 1.3 km”, *Nature* **526**, 682-686 (2015).
- [78] M.R. Andrews, C.G. Townsend, H.J. Miesner, D.S. Durfee, D.M. Kurn and W. Ketterle, “Observation of interference between two Bose condensates”, *Science* **275**, 637-641 (1997).

- [79] F. Laloë, “The hidden phase of Fock states, quantum non-local effects”, *Eur. Phys. J. D* **33**, 87-97 (2005); F. Laloë and W.J. Mullin, “Non-local quantum effects with Bose-Einstein condensates”, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 150401 (2007).
- [80] R.P. Feynman and A.R. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals*, McGraw Hill (1965).
- [81] J. Zinn-Justin, *Intégrale de chemin en mécanique quantique : Introduction*, CNRS Editions et EDP Sciences (2003).
- [82] M. Le Bellac, *Physique quantique*, EDP Sciences et CNRS Editions (2013), tome II, chapitre 12.
- [83] D.M. Ceperley, “Path integrals in the theory of condensed helium”, *Rev. Modern Physics*, **67**, 279-355 (1995).
- [84] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer et B. Roulet, *Physique statistique*, Hermann (1989).
- [85] K. Huang, *Statistical mechanics*, Wiley (1963).
- [86] F. Reif, *Fundamental of statistical and thermal physics*, McGraw-Hill (1965).
- [87] E. Wigner, “On the quantum correction for thermodynamic equilibrium”, *Phys. Rev.* **40**, 749-759 (1932).
- [88] M. Hillery, R.F. O’Connell, M.O. Scully and E.P. Wigner, “Distribution functions in physics; fundamentals”, *Physics Reports*, **106**, 121-167 (1984).
- [89] A. Perelomov, “Generalized coherent states and their applications”, Springer (1986); voir particulièrement le chapitre 16.
- [90] C.K. Zachos, D. Fairlie and T.L. Cutright, *Quantum mechanics in phase space*, World Scientific, Singapore (2005); avec le même titre, *Asia Pacific Newsletters*, **01**, 37-46 (2012) ou ArXiv :1104.5269v2.
- [91] G.G. Athanasiu and E.G. Fioratos, “Coherent states in finite quantum mechanics”, *Nuclear Physics B* **425**, 343-364 (1994).
- [92] L. Landau et E. Lifchitz, *Mécanique*, § 42, Editions en langues étrangères, Moscou (1960).
- [93] H. Goldstein, C.P. Poole et J.L. Safko, *Classical mechanics*, Addison-Wesley (2001).
- [94] N.L. Balazs and B.K. Jennings, “Wigner’s function and other distribution functions in mock phase spaces”, *Physics Reports*, **104**, 347-391 (1984).

Index

- Absorption du champ, 582
Absorption et émission de photons, 503
Action, 409
Amplitude de probabilité de détection (photon), 600
Angle quantique, 694
Annihilation (opérateur), 7
Annihilation-création de paires, 256, 303, 312
Anormale (dispersion), 582
Anormale (valeur moyenne), 278
Anormales (valeurs moyennes), 253
Anticommutation, 10
Anticommutation (opérateur champ), 174
Antinormale (fonction de corrélation), 204, 211
Appariement (terme d'), 303
Appariés (états), 235
Argument EPR, 641
Atome habillé, 561, 565
Atome habillé (couplage faible), 569
Atome habillé (couplage fort), 574
Atome habillé (diagramme), 566
Atome unique, 554
Atomes (miroirs pour), 587
Attractifs (bosons), 168
Autler-Townes (doublet), 578

Bardeen-Cooper-Schrieffer, 315
BCHSH (inégalités), 646, 647
BCS, 315
BCS (mécanisme physique), 341
BCS, blocage de phase, 341
BCS, condition de blocage de phase, 320, 343
BCS, états excités, 346
BCS, excitations élémentaires, 351
BCS, gap, 321, 323, 351
BCS, longueur de cohérence, 336
BCS, ordre non diagonal, 339
BCS, paires brisées et paires excitées, 347
Bell (théorème de), 641
Bi-orthonormale (décomposition), 630
Bitter, 489

Blocage de phase BCS, 320, 343
Blocage des phases (bosons), 366, 372
Blocage du recul, 464
Bogolubov (hamiltonien de), 381
Bogolubov (méthode opératoire), 379
Bogolubov (phonons, spectre), 76
Bogolubov (transformation), 379
Bogolubov-Valatin (transformation de), 261, 346
Bohr, 644
Boltzmann (distribution), 42
Bose-Einstein (condensation de paires), 284
Bose-Einstein (condensation), 51, 361
Bose-Einstein (distribution), 42
Bosons à température non nulle, 165
Bosons appariés, 306
Bosons attractifs, 168
Bosons attractifs (instabilité), 165
Bosons condensés, 51
Bosons dans un état de Fock, 198
Brossel, 489

Canonique(ensemble), 725
Canoniques (relations de commutation), 412
Cascade radiative de l'atome habillé, 578
Chaîne de von Neumann, 637
Champ (dispersion et absorption), 580
Champ (fonctions de corrélation spatiales), 178
Champ (opérateur), 172
Champ de paires, 271
Champ de paires (commutation), 288
Champ électrique quantifié, 428, 433
Champ électromagnétique (énergie), 394
Champ électromagnétique (impulsion), 395, 447
Champ électromagnétique (lagrangien), 414, 420
Champ électromagnétique (moment cinétique), 396, 473
Champ électromagnétique et oscillateurs harmoniques, 396
Champ magnétique quantifié, 428, 433

- Champ moyen de Hartree-Fock, 95, 113, 126, 144
 Champs laser intenses, 559
 Changement de base, 12
 Chemins de Feynman, 703
 Coefficients d'Einstein, 513
 Cohérent (état du champ), 436
 Commutation, 10
 Commutation (opérateur champ), 174
 Commutation (relations de), 412
 Commutation des opérateur de champ de paires, 288
 Commutation du champ (relations de), 418, 424
 Complexes (variables dans lagrangien), 410
 Composantes de fréquences positives et négatives, 502
 Condensat de Bose-Einstein, 368
 Condensat fragmenté, 68
 Condensation de Bose-Einstein, 51
 Condensation de Bose-Einstein (bosons répluifs), 361
 Condensation de Bose-Einstein de paires, 284
 Condensats (phase relative), 673
 Condensats à spin, 690
 Conjugués (moments), 411, 416, 423
 Contextualité, 667
 Contractions, 226
 Conversion paramétrique, 615
 Cooper (paires de), 355
 Corrélacion (fonctions de), 203, 228
 corrélacions, 667
 Corrélacions classiques et quantiques, 656
 Corrélacions spatiales (gaz parfait), 191
 correlations temporelles (photons de fluorescence), 578
 Coulomb (champ de), 390
 Coulomb (jauge de), 393
 Couplage faible (atome habillé), 569
 Couplage fort (atome habillé), 574
 Courant de particules, 177
 Création (opérateur), 6
 Création et annihilation (opérateurs), 419
 Critique (vitesse), 88
 Décélération d'un jet atomique, 453
 Décohérence, 636
 Décomposition de Schmidt, 629
 Dégrouper (photons), 554
 Delta (fonction d'un opérateur), 737
 Densité d'états, 324
 Densité de lagrangien, 414
 Densité de particules (opérateur), 177
 Déplacements lumineux, 570, 585
 Déplétion quantique, 368
 Détecteur (photons), 599
 Détection non destructive d'un photon, 593
 Déterminant de Slater, 97
 Deux particules (opérateur à), 19, 22, 44, 176
 Deux photons (interférences), 605, 618
 Deux photons (transitions à), 529
 Développement de l'opérateur d'évolution, 500
 Développement en gradients (transformation de Wigner), 753
 Diagramme (atome habillé), 566
 Diffusion d'impulsion, 459
 Diffusion de photons par un atome, 516
 Diffusion élastique (photons), 516
 Diffusion inélastique, 521
 Diffusion Raman, 521
 Diffusion Raman stimulée, 523
 Diffusion Rayleigh, 519
 Diffusion résonnante, 520
 Dipolaire (hamiltonien), 440
 Dipolaires (pièges), 585
 Dipolaires électriques (transitions), 486
 Direct et échange (termes), 24, 44, 46, 61, 64
 Dispersion anormale, 582
 Dispersion et absorption du champ, 580
 Distribution à eux particules BCS, 328
 Distribution de Boltzmann, 42
 Distribution de Bose-Einstein, 42
 Distribution de Fermi-Dirac, 42, 135
 Divergence de l'énergie, 435
 Doppler (effet), 450
 Doppler (refroidissement), 454
 Doppler (spectroscopie sans effet), 538
 Doppler (température), 461
 Double condensat, 673

- Double condensat à spin, 690
- Double résonance (méthode de la), 489
- Doublet Autler-Townes, 578
- Durée de vie radiative, 512

- Echange, 23
- Echange (trou d'), 196
- Echange d'intrication, 668
- Écoulements métastables, 83
- Effectif (hamiltonien), 574
- Effet Autler-Townes, 578
- Effet Doppler, 450
- Effet Doppler relativiste, 451
- Effet Mössbauer, 468
- Effet photo-électrique, 542
- Effets coopératifs BCS, 343
- Einstein, 513, 542
- Einstein (coefficients d'), 513
- Einstein-Podolsky-Rosen, 641, 698
- Élargissement radiatif, 570
- Éléments de réalité, 641
- Émergence d'une phase relative, 689
- Émergence d'une phase relative entre condensats, 685
- Emission de photons, 510
- Emission induite, 511
- Emission spontanée, 512, 568
- Énergie cinétique du champ, 184
- Énergie d'interaction du champ, 185
- Énergie d'un état apparié, 295
- Énergie de condensation BCS, 344
- Énergie de Fermi, 194
- Énergie de recul, 451
- Énergie du champ électromagnétique, 394
- Énergie et impulsion du champ transverse, 401
- Énergie libre, 727
- Énergie potentielle du champ, 185
- Ensemble canonique, 725
- Ensemble grand-canonique, 727
- Ensemble micro-canonique, 721
- Ensembles statistiques, 732
- Entanglement swapping, 668
- Entropie, 722
- Entropie statistique, 653
- EPR, 641, 698
- EPR (éléments de réalité), 641

- EPRB, 642
- Equation d'état (bosons répulsifs), 165
- Equation d'état (gaz parfait), 52
- Equation intégrale (opérateur d'évolution), 499
- Equations de Hamilton-Jacobi, 410, 412, 417
- Equations de Lagrange, 411, 421
- Equations de Lorentz, 387
- Equations de Maxwell, 387
- Équilibre thermique (gaz parfait), 37
- Espace de Fock, 3
- Espace de Fock du champ libre, 433
- État apparié (énergie), 295
- État de Fock, 3, 26, 191, 536
- État relais, 517, 530, 532, 539
- États appariés, 235
- États appariés (construction), 242
- États excités BCS, 346
- États pointeurs, 636
- Évolution (opérateur), 499
- Évolution de l'opérateur champ, 186
- Excitations de Bogolubov, 77
- Excitations élémentaires BCS, 351

- Fantôme (composante de la transformée de Wigner), 761
- Fermi (énergie de), 194
- Fermi (niveau de), 33
- Fermi (surface de), 341
- Fermi-Dirac (distribution), 42
- Fermions appariés, 300
- Fermions dans un état de Fock, 194
- Fletcher, 543
- Fluctuations d'intensité, 558
- Fluctuations des nombres d'occupation (bosons), 46
- Fluctuations du vide, 436
- Fluide de probabilité, 746
- Fluorescence (triplet), 577
- Fock (espace de), 3, 433
- Fock (état de), 3, 26, 191, 536
- Fonction d'onde de paires, 277
- Fonction d'onde de paires BCS, 328, 336
- Fonction de corrélation (dipôle et champ), 545

- Fonction de corrélation antinormale, 204, 211
- Fonction de corrélation normale, 204, 210
- Fonction de distribution (bosons), 41
- Fonction de distribution (fermions), 41
- Fonction de partition, 38, 39, 135
- Fonction spectrale, 218
- Fonctions de corrélation pour processus à un photon, 514
- Fonctions de corrélation spatiales du champ, 178
- Fonctions de distribution, 37, 153
- Fonctions de distribution BCS, 326
- Fonctions de Green (évolution), 207
- Fragmentation (bosons), 68, 198
- Fragmentation d'un condensat, 68
- Friction (coefficient de), 456

- Gap BCS, 321, 323, 351
- Gaussien (paquet d'ondes), 743
- Gaz parfait, 37, 209, 214, 228
- Gaz parfait (corrélations), 191
- GHZ (état), 658, 663
- Gibbs-Duhem (relation de), 732
- Grand potentiel, 39, 139
- Grand-canonique, 38
- Grand-canonique (ensemble), 727
- Grand-potentiel, 728
- Green (fonction de), 203, 208, 212
- Greenberger-Horne-Zeilinger, 663
- Groenewold (formule de), 754
- Gross-Pitaevskii (équation de), 57, 73
- Groupement (de bosons), 199

- Habillé (atome), 561, 565
- Habillés (états et énergies), 565
- Hamilton-Jacobi (équations de), 410, 412, 417
- Hamiltonien, 412, 417, 424
- Hamiltonien dipolaire électrique, 440
- Hamiltonien effectif, 574
- Hanbury Brown et Twiss, 553
- Hartree-Fock (approximation de), 95, 119
- Hartree-Fock (équations de), 105, 150
- Hartree-Fock (équations dépendant du temps), 126
- Hartree-Fock (équilibre thermique), 129, 153
- Hartree-Fock (potentiel de), 124
- Hartree-Fock dépendant du temps, 119
- Hartree-Fock pour des électrons, 114
- Heisenberg (point de vue de), 184
- Histoires classiques, 708

- Impulsion (diffusion d'), 459
- Impulsion du champ électromagnétique, 395, 447
- Indice de réfraction, 582
- Induite (émission), 511
- Inégalités de Bell, 644
- Intégrale de chemin, 703
- Intenses (champs laser), 559
- Intensives ou extensives (variables), 729
- Interaction (point de vue d'), 500
- Interactions du champ avec un atome, 438
- Interactions entre champ et particules, 437
- Intéférences (photons), 602
- Interférences à deux photons, 605, 618
- Intrication (échange), 668
- Intrication quantique, 623, 629, 640, 679
- Ionisation (photo-), 541
- Ionisation tunnel, 559
- Isotrope (rayonnement), 509

- Jauge, 388, 391
- Jauge de Coulomb, 393
- Jet atomique (décélération), 453

- Kastler, 489, 492

- Lagrange (équations de), 411, 421
- Lagrange (multiplicateurs de), 717
- Lagrangien, 408
- Lagrangien (densité de), 414
- Lagrangien du champ électromagnétique, 414, 420
- Laguerre-Gauss (faisceaux de), 495
- Lamb (déplacement de), 436
- Large bande spectrale (détecteur), 599
- Laser (pièges), 585
- Laser Raman, 523
- Light shifts, 570, 585
- Loi de Planck, 513

- Longitudinaux (champs), 389
 Longueur de cohérence BCS, 336
 Longueur de relaxation, 67
 Lorentz (équations de), 387

 Magnétisme spontané de fermions, 157
 Magnétisme spontané de Stoner, 157
 Maxwell (équations de), 387
 Mécanique statistique (rappels de), 721
 Mesure idéale de von Neumann, 632
 Métastabilité de l'écoulement superfluide, 88
 Micro-canonique (ensemble), 721
 Millikan, 543
 Miroirs pour atomes, 587
 Modèle de Cooper, 355
 Modes du rayonnement, 402, 404
 Mollow, 578
 Moment cinétique du champ électromagnétique, 396, 473
 Moments conjugués, 411, 416, 423
 Monogamie quantique, 657
 Mössbauer (effet), 468
 Multiphotoniques (transitions), 469, 529
 Multiplicateurs de Lagrange, 717
 Multipolaires (ondes), 483

 Nécessité d'un traitement quantique, 550, 553
 Négatives et positives (composantes du champ), 502
 Niveau de Fermi, 33
 Nombre d'occupation, 3
 Nombre d'occupation (opérateur), 9
 Nombre de photons, 567
 Nombre total de particules (gaz parfait), 47
 Non destructive (détection d'un photon), 593
 Non diagonal (ordre à longue distance), 195, 200
 Non-localité, 641
 Non-séparabilité, 644
 Normale (fonction de corrélation), 204, 210

 Ondes multipolaires, 483
 Opérateur champ, 172
 Opérateur champ (évolution), 184, 186

 Opérateur d'annihilation, 7
 Opérateur d'évolution, 499
 Opérateur de création, 6
 Opérateur de création d'une paire de particules, 238, 272
 Opérateur de Weyl, 738
 Opérateur densité à une particule de Hartree-Fock, 110
 Opérateur "densité de particules", 177
 Opérateur densité réduit, 18
 Opérateur nombre d'occupation, 9
 Opérateur réduit à une particule, 18
 Opérateurs à deux particules, 19, 22, 44, 176
 Opérateurs à une particule, 14, 17, 40, 176
 Opérateurs de création et annihilation, 419
 Opérateurs symétriques, 14, 17, 19, 22, 40, 44, 175
 Optiques (réseaux), 588
 Orbital (moment cinétique du rayonnement), 482
 Ordre non diagonal à longue distance, 195, 200
 Oscillation de Rabi, 566

 Paire de particules (opérateur de création), 238, 272
 Pairers de Cooper, 355
 Paires (fonction d'onde de), 277
 Paires BCS (fonction d'onde de), 328, 336
 Paires brisées et paires excitées, 347
 Paquet d'ondes (un photon), 603
 Paquet d'ondes gaussien, 743
 Paquets d'ondes (photons), 597
 Paquets d'ondes à deux photons, 615
 Paramètre d'ordre des paires, 277
 Paramétrique (conversion), 615
 Parité, 538
 Particules et trous, 33
 Particules identiques, 1
 Penrose-Onsager (critère de), 198, 287, 375
 Peres, 648
 Phase relative (condensats à spin), 689
 Phase relative de deux condensats, 673

- Phase relative entre condensats, 685
Phase relative entre deux condensats, 694
Phonons de Bogolubov, 76
Photo-détection double, 607, 619
Photo-détection simple, 604, 605
Photo-électrique (effet), 542
Photo-ionisation, 541, 599
Photo-ionisation (deux photons), 556
Photo-ionisation (taux de), 547, 557
Photons, 432, 434, 542
Photons (absorption et émission), 497
Photons (nombre de), 567
Photons (vide de), 435
Pièges dipolaires, 585
Pièges laser, 585
Planck (loi de), 513
Point de vue d'interaction, 500
Point de vue de Heisenberg, 184
Pointeurs (états), 636
Polarisation du champ électromagnétique, 398
Pompage optique, 492, 573
Postulat de projection de Von Neumann, 638
Potentiel chimique, 723
Potentiel de Hartree-Fock, 124
Potentiel thermodynamique (minimisation), 133
Potentiels scalaire et vecteur, 388, 391
Pression (gaz parfait), 52
Pression de radiation, 452
Principe de moindre action, 409
Probabilité d'absorption d'un photon, 506
Processus d'annihilation-création de paires, 256, 303, 312
Produit d'opérateurs (transformée de Wigner), 751
Propagateur d'une particule, 704, 708
Quantification d'un champ, 186
Quantification du champ, 427
Quasi-classique (état du champ), 436
Quasi-classiques (situations), 745
Quasi-distribution, 738, 748
Quasi-particules, 156, 265
Quasi-particules (phonons de Bogolubov), 382
Quasi-particules (vide de), 261
Quel chemin (expérience), 639
Rabi (oscillation de), 566
Ralentissement des atomes, 453
Raman (diffusion), 521
Raman (laser), 523
Raman stimulée (diffusion), 523
Rang de Schmidt, 632
Rayleigh (diffusion), 519
Rayon de Fermi, 33
Rayonnement isotrope, 509
Réalisme local, 641, 646, 666
Recul (atome libre), 448
Recul (énergie de), 451
Refroidissement des atomes, 453
Refroidissement Doppler, 454
Refroidissement par évaporation, 462
Refroidissement Sisyphe, 462
Refroidissement subrecul, 462
Règle de quantification, 710
Règles de sélection, 442, 486
Relais (état), 517, 530, 532, 539
relation de Gibbs-Duhem, 732
Relativiste (effet Doppler), 451
Relaxation (longueur de), 67
Renormalisation, 435
Réseaux optiques, 588
Résonante (diffusion), 520
Schmidt (décomposition de), 629
Schmidt (rang de), 632
Schrödinger, 626
Seconde quantification, 187
Semi-classiques (situations), 745
Séparabilité, 644, 659
Séparable (opérateur densité), 659
Sisyphe (effet), 589
Sisyphe (refroidissement), 462
Slater (déterminant), 97
Spectre des excitations BCS, 351
Spectroscopie sans effet Doppler, 538
Spin 1 et rayonnement, 474, 479, 480
Spontanée (émission), 512, 568
Sub-Doppler (refroidissement), 589
Subrecul (refroidissement), 462
Superfluidité, 83, 92

- Suppression du recul, 468, 469
 Surface de Fermi modifiée, 341

 Tamasic (composante de la transformée de Wigner), 762
 Taux de photo-ionisation, 547, 557
 Température Doppler, 461
 Terme d'appariement, 303
 Terme direct et d'échange, 24, 44, 46, 61, 64
 Théorème de Bell, 641, 645
 Théorème de Wick, 223, 227
 Tore (écoulement dans un), 83
 Transformation de Bogolubov, 379
 Transformation de Bogolubov-Valatin, 261, 346
 Transformation de jauge, 388
 Transformée de Wigner, 735
 Transition virtuelle, 533
 Transitions à deux photons, 529
 Transitions dipolaires électriques, 486
 Transverses (champs), 389
 Triplet de fluorescence, 577
 Trou d'échange, 196
 Trous, 33
 Trous (création et d'annihilation), 34
 Tunnel (ionisation), 559

 Une particule (opérateur à), 14, 17, 40, 176
 Unicité du résultat de mesure, 637

 Valeurs moyennes anormales, 253
 Variables continues (dans lagrangien), 413
 Variables intensives ou extensives, 729
 Variables normales du champ, 399
 Vide (état du), 6
 Vide d'excitations, 35
 Vide de photons, 435
 Vide de quasi-particules, 261
 Violations des inégalités de Bell, 646, 701
 Virtuelle (transition), 533
 Vitesse critique, 88
 Von Neumann (chaîne de), 637
 Von Neumann (entropie statistique), 653
 Von Neumann (mesure idéale), 632
 Von Neumann (postulat de réduction), 638
 Vortex dans un superfluide, 83

 Weyl (opérateur de), 738
 Wick (théorème de), 223, 227
 Wigner (transformée de), 735

MÉCANIQUE QUANTIQUE III

CLAUDE COHEN-TANNOUJJI
BERNARD DIU
FRANCK LALOË

Cet ouvrage fait suite aux deux premiers volumes *Mécanique quantique - Tomes I et II* (publication aux Éditions Hermann, première édition en 1973).

Ce troisième tome de mécanique quantique se place dans la même optique que les précédents tomes, avec une rédaction où toutes les étapes des raisonnements sont explicitées et les calculs détaillés. Chaque chapitre est suivi d'une série de compléments destinés à appliquer à un certain nombre d'exemples intéressants les connaissances acquises. L'ouvrage s'adresse à des physiciens ou des chimistes déjà familiers avec les principes de base de la mécanique quantique.

La première partie de l'ouvrage concerne l'étude des ensembles de particules identiques, le formalisme des opérateurs de création et d'annihilation, des opérateurs champ, etc. De nombreux exemples sont traités dans les compléments, en particulier les méthodes de champ moyen (équations de Hartree-Fock pour des fermions, de Gross-Pitaevskii pour des bosons). L'appariement en mécanique quantique est introduit en traitant dans un même cadre général fermions (théorie « BCS », pour Bardeen-Cooper-Schrieffer) et bosons (théorie de Bogolubov). La seconde partie concerne la théorie quantique du champ électromagnétique : émission spontanée, transitions à plusieurs photons, atome habillé, etc. avec des perspectives sur des méthodes expérimentales comme le pompage optique et le refroidissement et le piégeage d'atomes par des faisceaux laser. Un dernier chapitre traite de l'intrication quantique, de l'argument d'Einstein, Podolsky et Rosen ainsi que du théorème de Bell, insistant ici aussi sur l'importance des corrélations.

Claude Cohen-Tannoudji a été chercheur CNRS, puis professeur successivement à l'Université de Paris et au Collège de France, donnant des cours dont l'influence scientifique a été considérable. Il a été lauréat du Prix Nobel en 1997, avec Steve Chu et Williams Phillips, pour ses nombreuses contributions à la recherche, en particulier dans le domaine du refroidissement et du piégeage d'atomes par des faisceaux laser.

Bernard Diu a été professeur à l'Université de Paris et y a enseigné divers domaines de la physique, en particulier la mécanique quantique et la physique statistique, sur laquelle il a écrit un ouvrage de référence avec trois co-auteurs. Il a toujours montré un intérêt soutenu pour l'enseignement et la diffusion des sciences. Son domaine de recherche principal est la physique des particules.

Franck Laloë a été maître-assistant attaché aux cours de mécanique quantique, puis chercheur CNRS au sein du Laboratoire Kastler Brossel. Ses travaux de recherches ont porté sur divers effets liés aux statistiques quantiques, l'orientation nucléaire de l'hélium trois par pompage optique, les ondes de spin dans les gaz à basse température, et divers aspects de la mécanique quantique fondamentale.

Série Physique dirigée par Michèle LEDUC et Michel LE BELLAC

SAVOIRS ACTUELS

Collection dirigée par Michèle LEDUC

CNRS ÉDITIONS

www.cnrseditions.fr



edp sciences
www.edpsciences.org

Création graphique : Béatrice Couédel



ISBN EDP Sciences 978-2-7598-2107-5
ISBN CNRS ÉDITIONS 978-2-271-11808-0

55 €

Ces ouvrages, écrits par des chercheurs, reflètent des enseignements dispensés dans le cadre de la formation à la recherche. Ils s'adressent donc aux étudiants avancés, aux chercheurs désireux de perfectionner leurs connaissances ainsi qu'à tout lecteur passionné par la science contemporaine.