

MÉCANIQUE QUANTIQUE I

Cours pour la deuxième année de Bachelor en physique

Ruth Durrer

Département de Physique Théorique de l'Université de Genève
2022, révisé 2023

Assistants : Rahel Baumgartner, William Matthewson
Bharathkumar Radhakrishnan



**UNIVERSITÉ
DE GENÈVE**

Table des matières

1	Mécanique des ondes et équation de Schrödinger	7
1.1	Introduction	7
1.2	Ondes et interférence	7
1.3	L'équation de Schrödinger	10
1.3.1	La vitesse de groupe	12
1.3.2	L'équation de Schrödinger libre	13
1.3.3	L'équation de Schrödinger	17
1.4	L'oscillateur harmonique	21
1.4.1	Une solution générale de l'équation Schrödinger dépendante du temps	28
1.5	L'atome d'hydrogène	29
2	Interprétation de la fonction d'onde	36
2.1	Interprétation statistique de la fonction d'onde	37
2.2	Plusieurs particules	38
2.3	Valeurs d'attente, bras et kets	40
2.3.1	Le théorème de Ehrenfest	45
2.4	Les relations de commutation canoniques et la relation d'in- certitude	47
2.5	Relation d'incertitude et complémentarité	50
2.5.1	Changement de l'état lors d'une mesure de position	50
2.5.2	Mesures de position	52
2.5.3	Mesure de l'impulsion	54

2.5.4	Expérience de la double fente	55
2.6	La limite classique	56
2.7	L'approximation WKB	58
2.7.1	L'effet tunnel	61
3	Les principes formels de la mécanique quantique	64
3.1	Structure cinématique : états, observables valeurs d'attentes .	64
3.1.1	Mesure spectrale, le spectre d'un opérateur	65
3.2	Relation d'incertitude généralisée	70
3.3	Mesure idéale et réduction d'état	71
3.4	Etats mixtes, l'opérateur densité	72
3.5	Union de deux systèmes quantiques	73
3.6	Symétries, dynamique, quantités conservées	74
3.6.1	Automorphismes de Wigner	74
3.6.2	Dynamique	75
3.6.3	Observables conservées	76
3.7	Représentations de Schrödinger, Heisenberg et interaction . . .	77
4	Des particules avec moment cinétique, le spin	82
4.1	Invariance sous rotation et moment cinétique pour des parti- cules sans spin	82
4.2	Le groupe de rotation en mécanique quantique	86
4.3	Le groupe $SU(2)$ comme revêtement universel de $SO(3)$	89
4.4	Moment cinétique et parité	93
4.5	Les représentations irréductibles du groupe $SU(2)$	96
4.6	La série de Clebsch-Gordan	102
4.7	Des particules avec spin, l'équation de Pauli	107
4.8	Systèmes de spin $1/2$	111
5	Intrication quantique, EPR et l'inégalité de Bell	116
5.1	Des particules identiques, des bosons et des fermions	116

5.2	Etats intriqués et le paradoxe de Einstein-Podolsky-Rosen (EPR)	120
5.3	L'inégalité de Bell	122
5.4	Le théorème de non-clonage	125
A	ANNEXES MATHÉMATIQUES	127
A.1	Intégrales de Fresnel	127
A.2	Les harmoniques sphériques	129
A.3	Les polynômes de Laguerre	139
A.4	Groupe, faits élémentaires	141
A.5	Représentations, faits élémentaires	144
A.6	Groupes de Lie, algèbres de Lie	148

Préface

La mécanique classique et l'électrodynamique (ainsi que la relativité générale) donnent une bonne description des phénomènes à l'échelle humaine, du moins au niveau macroscopique. Par contre, à l'échelle atomique, ces théories ne décrivent pas correctement les phénomènes. Ceci a été clair dès la découverte des atomes, prédits au 19^{ième} siècle par Dalton et plus tard Boltzmann. Si un électron est en orbite circulaire autour d'un proton, d'après les lois de l'électrodynamique classique, il devrait rayonner et perdre son énergie, et il tomberait sur le noyau en quelques millisecondes. Pourquoi donc les atomes sont-ils stables ?

La mécanique quantique (MQ) ne donne pas seulement une réponse à cette question (et d'autres) mais elle nous permet aussi de calculer les niveaux discrets d'énergie qu'un atome peut assumer, ce qui a été vérifié expérimentalement avec grande précision. Ces 'spectres atomiques' ont été connus par les physiciens, chimistes et astronomes déjà au 19^{ième} siècle, cependant sans les comprendre.

Comme nous le verrons la 'réalité' décrite par la MQ est très bizarre. Les notions de 'particules' et de 'onde' ne sont pas applicables sur des 'quanta' qui se comportent parfois comme une onde et parfois comme une particule, sans être ni l'un ni l'autre. Dans ce cours nous présentons les lois de la physique microscopique (non-relativiste). Nous présentons des équations qui nous permettent de calculer des résultats expérimentaux. Nous ne donnons pas de véritable 'dérivation' de ces lois physiques, c'est-à-dire nous n'expliquons pas pourquoi la nature est comme elle est. Nous motivons quand même une des équations principales, l'équation de Schrödinger. Par contre, le but final de la physique est de découvrir comment est la nature et de la décrire avec des lois aussi simples et aussi peu nombreuses que possible.

Est-ce qu'on peut 'comprendre' la MQ ? Dans le sens de l'expliquer avec des phénomènes qui nous sont familiers à partir du comportement des objets à échelle humaine, non.

Le lauréat du Prix Nobel (1965) Richard Feynman a dit :

"If you think you understand quantum mechanics, you don't understand quantum mechanics." ou encore

"Quantum mechanics describes nature as absurd from the point of view of common sense. And yet it fully agrees with experiment. So I hope you can accept nature as She is - absurd."

Un des fondateurs de la MQ, Nils Bohr (lauréat du Prix Nobel 1922) a dit :

"If you can fathom quantum mechanics without getting dizzy, you don't

get it".

Contrairement à l'électrodynamique, ou encore plus la relativité générale, la mécanique quantique n'est pas l'oeuvre d'une ou deux personnes. C'est toute une suite de physicien-ne-s qui y ont contribué de façon importante dans les années 1920/30, quand elle fut développée. Les personnes principales sont probablement Planck, Sommerfeld, Einstein, Schrödinger, Bohr, Heisenberg, Born, Pauli et Dirac. Même si les quatre premiers dans cette liste n'ont jamais pu l'accepter dans sa forme finale, en particulier ce qui concerne l'interprétation de la fonction d'onde et le processus de mesure. Pour citer un énoncé de Schrödinger :

"Wenn es bei dieser verdamnten Quantenspringerei bleibe sollte, so bedauere ich es, mich mit der Quantentheorie überhaupt beschäftigt zu haben."

E. Schrödinger (1926)

Comme nous le verrons, un des plus grand problèmes de la MQ est le processus de mesure : en physique classique nous mesurons les propriétés d'un système comme elles sont. En mécanique quantique nous ne pouvons plus négliger qu'une mesure est une interaction de notre appareil avec le système qui alors influence le système. L'état du système avant et après une mesure n'est donc plus le même.

Chapitre 1

Mécanique des ondes et équation de Schrödinger

1.1 Introduction

Les premières indications que la physique classique 'ne marche pas' sont en effet venues avec la théorie du rayonnement du corps noir qui, dans une analyse classique du champ électromagnétique mène à une divergence, appelée la 'catastrophe ultraviolette'. Vous allez discuter ceci en Mécanique Quantique II. Avant cela, on a observé les lignes spectrales des atomes, mais je ne crois pas que les chercheur/euses ont réalisés que ceci était incompatible avec le modèle classique de l'atome et l'électrodynamique classique. Le fait que la matière a des propriétés ondulatoires a été trouvé expérimentalement seulement après le développement de la mécanique quantique (en 1927 pour des électrons, Davisson & Germer ; et en 1929 pour des atomes d'hélium, Stern). Malgré ceci, ce cours, qui ne suit pas les événements historiques, commence avec la nature ondulatoire de la matière.

1.2 Ondes et interférence

Nous considérons d'abord une onde d'eau plane qui propage sur la surface d'un lac dans une direction $\hat{\mathbf{k}}$ (voir fig. 1.1).

Pour une position $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ sur le lac, nous pouvons décrire la hauteur de

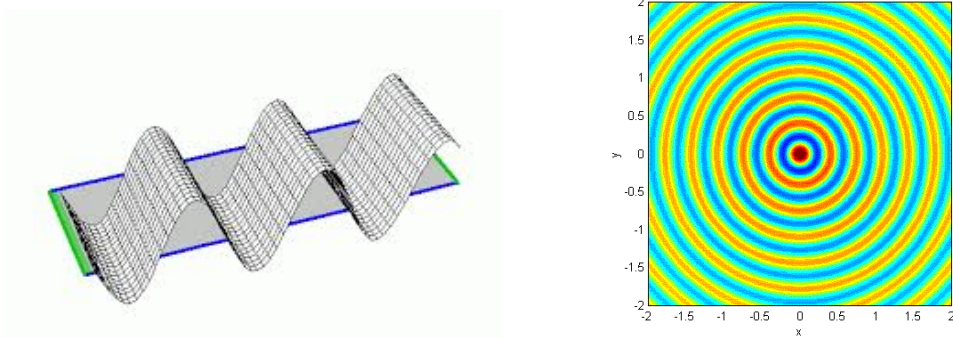


FIGURE 1.1 – Une onde plane à un moment de temps fixé, t .
 (Source : <https://sites.google.com/site/nordinznotes/simple-fdtd/plane-waves>)

l'eau comme $h(\mathbf{x}, t) = h_0 + \phi(\mathbf{x}, t)$ avec

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}, t) &= A \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t) + B \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t) \\ &= \text{Re} [\phi_0 \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t))] \quad \text{avec} \quad \phi_0 = B - iA. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Pour t fixé on voit l'image de gauche de la fig. 1.1. Pour \mathbf{x} fixé, la hauteur de l'eau oscille dans le temps. Une crête de l'onde se propage en direction \mathbf{k} et y est normale.

Pour une onde sphérique qui est générée par une perturbation ponctuelle on a

$$\phi(r, t) = \text{Re} \left[\frac{\phi_0}{r} \exp(i(kr - \omega t)) \right]. \quad (1.2)$$

Pour t fixé on voit l'image de droit de la fig. 1.1.

La vitesse de propagation de l'onde (vitesse de phase) est donnée par la condition de phase constante, c'est-à-dire

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t = \text{const.} \quad \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 + \mathbf{k}\omega t/k^2 = \mathbf{x}_0 + \mathbf{v}t, \quad (1.3)$$

$$\mathbf{v} = \frac{\omega}{k} \hat{\mathbf{k}} \quad \text{pour l'onde plane, et}$$

$$kr - \omega t = \text{const.} \quad r(t) = r_0 + \omega t/k = r_0 + v_r t, \quad (1.4)$$

$$\mathbf{v} = \frac{\omega}{k} \mathbf{e}_r \quad \text{pour l'onde sphérique.}$$

Ici $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$ et $k = |\mathbf{k}|$. L'intensité d'une onde est donnée par le carré de son amplitude moyenné sur une période,

$$I(\mathbf{x}) = \langle \phi(\mathbf{x}, t)^2 \rangle_T = \begin{cases} \frac{1}{2}(A^2 + B^2) = \frac{1}{2}|\phi_0|^2 & \text{pour une onde plane} \\ \frac{1}{2r^2}|\phi_0|^2 & \text{pour une onde sphérique.} \end{cases} \quad (1.5)$$

Pour une onde sphérique l'intégrale de l'intensité sur une sphère à rayon r est $4\pi r^2 I(r) = 2\pi|\phi_0|^2$ est constante.

Nous pouvons aussi considérer des ondes acoustiques ou encore lumineuses qui sont des ondes en 3 dimensions. Les premières sont des oscillations de la densité d'air tandis que les dernières sont des oscillations des champs électrique et magnétique qui vous discuteriez dans le cours d'électrodynamique. Pour des ondes en 3 dimensions, \mathbf{k} et \mathbf{x} sont des vecteurs 3d.

Nous voulons encore discuter le phénomène d'interférence qui est caractéristique pour des ondes. Pour ceci nous considérons de la lumière (ou de l'eau) qui est injecté par deux petits trous ('slits') séparés par une distance ℓ , comme dans la fig. 1.2, et génère deux ondes sphériques autour de ces trous. A une distance $D \gg \ell$, nous posons un écran et nous voulons discuter l'intensité de la lumière en fonction de la distance y du milieu de l'écran.

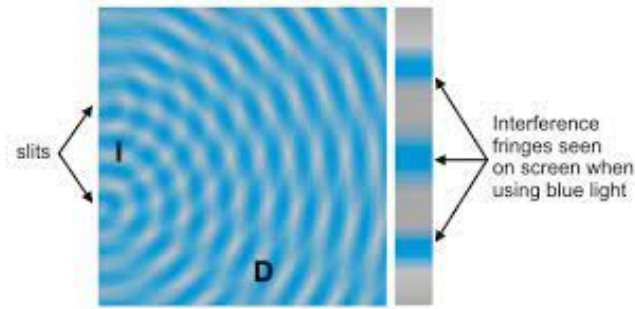


FIGURE 1.2 – La figure d'interférence de deux ondes sphériques monochromatique de lumière bleue.

(Source : <https://www.saburchill.com/physics/chapters2/0015.html>)

Nous choisissons la coordonnée verticale y et la coordonnée horizontale x telles que les deux trous soient positionnés à $\mathbf{x}^{(1)} = (0, \ell/2)$ et $\mathbf{x}^{(2)} = (0, -\ell/2)$. Les points sur l'écran ont les coordonnées $\mathbf{x} = (D, y)$. L'amplitude des deux ondes combinées sur l'écran est alors

$$\phi(y) = \frac{\phi_0}{r^{(1)}} \exp(i(kr^{(1)} - \omega t)) + \frac{\phi_0}{r^{(2)}} \exp(i(kr^{(2)} - \omega t)). \quad (1.6)$$

Nous rappelons que $D \gg \ell$ et nous pouvons négliger la différence entre $r^{(1)}$ et $r^{(2)}$ dans le pré-facteur mais pas dans l'exposant oscillant. Dans l'exposant,

nous développons

$$r^{(1)} = \sqrt{D^2 + (y - \ell/2)^2} \simeq D \left[1 + \frac{(y - \ell/2)^2}{2D^2} \right] = D + \frac{y^2 + (\ell/2)^2}{2D} - \frac{y\ell}{2D},$$

$$r^{(2)} = \sqrt{D^2 + (y + \ell/2)^2} \simeq D \left[1 + \frac{(y + \ell/2)^2}{2D^2} \right] = D + \frac{y^2 + (\ell/2)^2}{2D} + \frac{y\ell}{2D}.$$

Nous insérons ceci dans (1.6), ce qui donne

$$\phi(y) = \frac{\phi_0}{D} \exp \left(ik \left[D + \frac{y^2 + (\ell/2)^2}{2D} \right] - i\omega t \right) \left[\exp \left(-ik \frac{y\ell}{2D} \right) + \exp \left(ik \frac{y\ell}{2D} \right) \right]. \quad (1.7)$$

L'intensité est donc

$$I(y) = \frac{2|\phi_0|^2}{D^2} \cos^2 \left(y \frac{k\ell}{2D} \right). \quad (1.8)$$

Elle a des maxima et minima aux positions

$$y_n = n\pi \frac{2D}{k\ell}, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad \text{interférence constructive}, \quad (1.9)$$

$$y_{n+1/2} = (n + 1/2)\pi \frac{2D}{k\ell}, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad \text{interférence destructive}. \quad (1.10)$$

Ce phénomène d'interférence est très connu pour des ondes d'eau mais aussi pour la lumière monochromatique. Par contre, pour une source de particules, on s'attendrait à la superposition de deux gaussiennes derrière les trous. Surprenamment, pour des particules élémentaires (électrons, neutron, atomes) on trouve aussi de l'interférence, voir fig. 1.3.

Il y a encore plus bizarre : si on vérifie quel trou est emprunté par chaque électron, l'interférence disparaît et on trouve la superposition de deux gaussiennes, à laquelle on s'attendrait si les particules étaient des petites billes 'classiques'.

L'expérience 'double-slit' a été effectuée avec des particules pour la première fois en 1961 (Claus Jönsson, Tübingen). Entre temps, l'expérience 'double-slit' a été reproduite aussi avec des molécules qui contiennent jusqu'à 2000 atomes (Fein et al. 2019 [4]).

1.3 L'équation de Schrödinger

La matière a donc clairement des propriétés 'ondulatoires'. Quelle est donc la physique, ou l'équation, qui décrit le comportement de cette onde ?

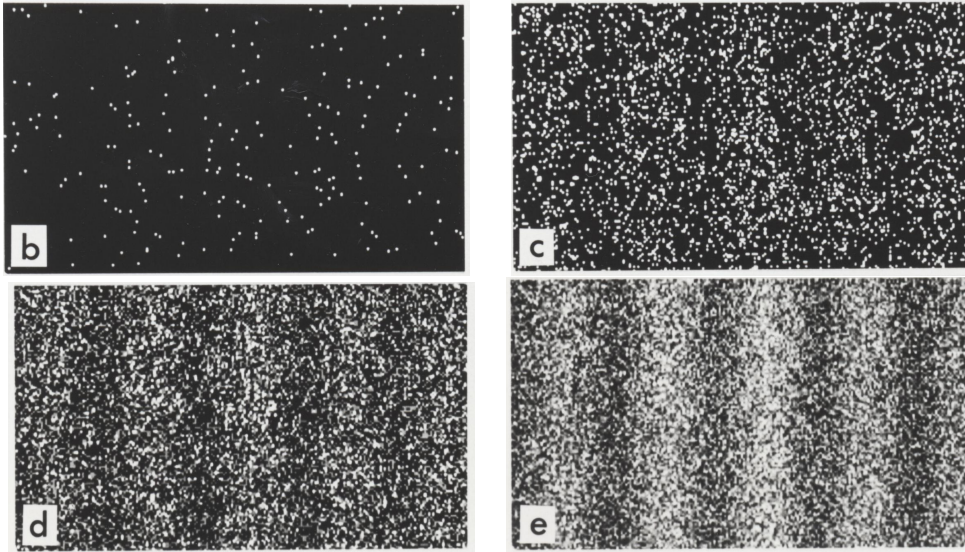


FIGURE 1.3 – Résultats d’une expérience ‘double-slit’ fait par Tonomura (A. Tomonura et al. Am. J. Phys. **57**, 117, 1989) qui montre la formation de la figure d’interférence à partir des électrons individuels. Leur nombre est de 200 (b), 6000 (c), 40000 (d), 140000 (e).
(source : wikipedia)

Les expériences ont montré que le nombre d’onde k d’une onde matérielle avec des particules de masse m est lié à la vitesse des particules via la relation de de Broglie,

$$\hbar k = p = mv = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}, \quad (1.11)$$

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (1.12)$$

$$\hbar = h/2\pi \equiv \frac{6.62607015}{2\pi} \times 10^{-27} \text{g cm}^2 \text{s}^{-1} \quad (1.13)$$

$$\begin{aligned} &\simeq 1.0546 \times 10^{-27} \text{erg} \cdot \text{s} \\ &\equiv \frac{6.62607015}{2\pi} \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s} \simeq 1.0546 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Ici h est la constante de Planck. Elle a l’unité¹ d’une action $[p \cdot x] = [E \cdot t] = [S] = [\int L dt]$. Sa valeur donnée en (1.13) a été fixée par convention en 2019.

1. Il est toujours important de connaître les unités. C’est une façon simple de découvrir des erreurs.

1.3.1 La vitesse de groupe

Les lois de la physique doivent fournir une relation entre le vecteur d'onde \mathbf{k} et la fréquence circulaire ω . Une telle relation $\omega(\mathbf{k})$ est appelée une 'relation de dispersion' et la dérivée, $\partial\omega/\partial\mathbf{k} = \mathbf{v}_g$ est appelée la 'vitesse de groupe' d'une onde. Si la relation de dispersion n'est pas linéaire, la vitesse de groupe n'est pas égale à la vitesse de phase définie par $\mathbf{v}_p = (\omega/k)\hat{\mathbf{k}}$. Pour trouver la relation de dispersion pour des particules libres, nous considérons un paquet d'onde donné par sa représentation Fourier,

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int A(\mathbf{k}) \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega(\mathbf{k})t)) d^3k, \\ \hat{\psi}(\mathbf{k}, t) &= A(\mathbf{k}) \exp(-i\omega(\mathbf{k})t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \psi(\mathbf{x}, t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) d^3x.\end{aligned}\tag{1.15}$$

Motivé(e)s par les expériences (voir fig. 1.3), nous supposons que l'intensité de l'onde est proportionnelle à la probabilité que la particule soit à une certaine position, et choisissons donc un paquet d'onde normalisé,

$$\boxed{1 = \int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \int |A(\mathbf{k})|^2 d^3k.}\tag{1.16}$$

Le dernier signe d'égalité est une conséquence de l'identité de Plancherel². La position moyenne de la particule est donc

$$\boxed{\langle \mathbf{x}_p \rangle(t) = \int d^3x \mathbf{x} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2.}\tag{1.17}$$

2. Voir méthodes math. II : la transformation de Fourier est une transformation unitaire de $L^2(\mathbb{R}^3)$ dans lui-même.

Nous introduisons la représentation Fourier et faisons une intégration par parties,

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{x}_p \rangle(t) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x \bar{\psi}(\mathbf{x}, t) \int d^3k A(\mathbf{k}) e^{-i\omega t} \mathbf{x} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x \bar{\psi}(\mathbf{x}, t) \int d^3k A(\mathbf{k}) e^{-i\omega t} \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x \bar{\psi}(\mathbf{x}, t) \int d^3k i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \left[A(\mathbf{k}) e^{-i\omega(\mathbf{k})t} \right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\
&= \int d^3k i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \left[A(\mathbf{k}) e^{-i\omega(\mathbf{k})t} \right] \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x \bar{\psi}(\mathbf{x}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}_{= \bar{A}(\mathbf{k}) e^{i\omega(\mathbf{k})t}} \\
&= i \int d^3k \bar{A}(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} A(\mathbf{k}) + t \int d^3k \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} |A(\mathbf{k})|^2 \tag{1.18}
\end{aligned}$$

$$= \mathbf{x}_0 + t \langle \mathbf{v}_g \rangle, \quad \text{avec} \tag{1.19}$$

$$\langle \mathbf{v}_g \rangle = \frac{d}{dt} \langle \mathbf{x}_p \rangle = \int d^3k \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} |A(\mathbf{k})|^2. \tag{1.20}$$

Pour une particule libre, ou pour un faisceau de particules libres à énergie fixe (faisceau monochromatique), $v_p = p/m = \hbar k/m$. Ceci implique

$$\frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} = \hbar \mathbf{k}/m, \quad \omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2m} \mathbf{k}^2, \tag{1.21}$$

à une constante près qui est sans intérêt. Ceci donne les relations de de Broglie,

$$p = \hbar k, \quad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \hbar \omega(k). \tag{1.22}$$

1.3.2 L'équation de Schrödinger libre

Nous considérons le paquet d'onde (1.15). Pour ceci nous trouvons

$$\begin{aligned}
\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar}{2m} \Delta \right) \psi(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k A(\mathbf{k}) \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar}{2m} \Delta \right) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega t)} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k A(\mathbf{k}) \left(\omega - \frac{\hbar k^2}{2m} \right) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega t)} \\
&= 0. \tag{1.23}
\end{aligned}$$

Ceci est l'équation de Schrödinger libre, c'est-à-dire dans le cas où il n'y a aucune force qui agit sur la particule.

Nous voulons trouver sa solution générale. Pour ceci nous étudions d'abord le cas où initialement la particule est fixée à la position $\mathbf{x} = 0$. Nous approchons ceci par la distribution delta de Dirac en trois dimensions (voir cours de méthodes math. II)

$$\psi(\cdot, 0) = \delta^{(3)}.$$

La transformation Fourier de ceci est une constante,

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x \psi(\mathbf{x}, 0) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}.$$

Dans l'espace Fourier, l'équation Schrödinger libre donne (voir exercices)

$$\frac{\hbar k^2}{2m} \hat{\psi}(\mathbf{k}, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\mathbf{k}, t) \quad (1.24)$$

avec la solution

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}, t) = \hat{\psi}(\mathbf{k}, 0) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}. \quad (1.25)$$

La transformation de Fourier inverse nous donne le résultat dans l'espace \mathbf{x} ,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \hat{\psi}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}. \quad (1.26)$$

Pour effectuer cette intégrale nous complétons le carré :

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \frac{\hbar k^2}{2m}t = -\frac{t}{2\hbar m} \left(\hbar \mathbf{k} - \frac{m}{t} \mathbf{x} \right)^2 + \frac{m}{2\hbar t} x^2.$$

Avec le changement de variable $\mathbf{k} \mapsto \mathbf{q} = \hbar \mathbf{k} - \frac{m}{\hbar t} \mathbf{x}$ nous trouvons

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3q e^{\frac{-it}{2\hbar m}q^2} \exp\left(\frac{im}{2\hbar t}x^2\right) \quad (1.27)$$

L'intégrale qui reste à faire est

$$\int d^3q e^{-i\alpha q^2} = \frac{1}{\alpha^{3/2}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} ds e^{-is^2} \right)^3.$$

Ici $s = \sqrt{\alpha}q_i$ pour chaque composante q_i . Ceci est une intégrale de Fresnel, voir Appendix A.1,

$$\int_{-\infty}^{\infty} ds e^{-is^2} = \sqrt{\pi} e^{-i\pi/4} = \sqrt{\frac{\pi}{i}}. \quad (1.28)$$

Avec ceci, la fonction d'onde dans l'espace des position devient

$$\boxed{\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{m^{3/2}}{(2\pi i \hbar t)^{3/2}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar t} x^2\right)}. \quad (1.29)$$

Ce résultat peut aussi être vérifié en appliquant l'opérateur de Schrödinger, $i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar}{2m}\Delta$, directement sur la fonction $\psi(\mathbf{x}, t)$.

Si nous considérons une particule qui est initialement pas à $\mathbf{x} = 0$ mais à $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$, il faut juste remplacer \mathbf{x} par $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$, et nous obtenons

$$\boxed{\psi(\mathbf{x}, t) = K(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) = \frac{m^{3/2}}{(2\pi i \hbar t)^{3/2}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar t} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2\right)}. \quad (1.30)$$

Nous considérons une onde avec une condition initiale quelconque, $\psi(\mathbf{x}, 0) = \phi(\mathbf{x})$. La solutions au temps t est alors (voir méthodes math. II)

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = \phi(\mathbf{x}) = \int d^3x' \phi(\mathbf{x}') K(\mathbf{x} - \mathbf{x}', 0) \quad (1.31)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3x' \phi(\mathbf{x}') K(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) \quad (1.32)$$

$$\boxed{\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{m^{3/2}}{(2\pi i \hbar t)^{3/2}} \int d^3x' \exp\left(\frac{im}{2\hbar t} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2\right) \phi(\mathbf{x}')}. \quad (1.33)$$

Ceci est la solution générale de l'équation de Schrödinger libre. Elle est bien défini si, $\phi \in L^2(\mathbb{R}^3) \cap L^1(\mathbb{R}^3)$ (espace des fonctions dont la valeur absolue et son carré sont les deux intégrables). De plus, nous avons

$$|\psi(\mathbf{x}, t)| \leq \frac{C}{(1 + |t|)^{3/2}}; \quad (1.34)$$

pour une constante C qui dépend ni de \mathbf{x} ni de t . La fonction d'onde restant normalisée,

$$\int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 1, \quad (1.35)$$

ceci implique qu'un paquet d'ondes initialement bien confiné à une petite région, s'élargit alors avec le temps. Ceci s'appelle la dissipation d'un paquet d'onde libre.

Nous voulons encore étudier le comportement à longs temps de la fonction d'onde libre. Soit $\phi(\mathbf{x}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ (espace de Schwarz, voir méthodes math. II)

la condition initiale et ψ la solution de $i\partial_t\psi = -(\hbar/2m)\Delta\psi$ avec $\psi(\mathbf{x}, 0) = \phi(\mathbf{x})$. Nous posons aussi

$$\chi_t(\mathbf{x}) = \left(\frac{m}{it}\right)^{3/2} e^{\frac{ix^2 m}{2\hbar t}} \hat{\phi}(m\mathbf{x}/\hbar t). \quad (1.36)$$

Ici $\hat{\phi}$ est la transformée de Fourier de ϕ . Nous allons démontrer que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|\psi(\mathbf{x}, t) - \chi_t(\mathbf{x})\|_{L^2} = 0. \quad (1.37)$$

Ici $\|\cdot\|_{L^2}$ est la norme en L^2 ,

$$\|f\|_{L^2} = \sqrt{\int |f(\mathbf{x})|^2 d^3x}.$$

Preuve. Pour la preuve nous posons $\hbar = 2m = 1$, et donc

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(4\pi it)^{3/2}} \int d^3y e^{i(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2/4t} \phi(y) \quad (1.38)$$

et

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, t) - \chi_t(\mathbf{x}) &= \frac{1}{(4\pi it)^{3/2}} e^{ix^2/4t} \int d^3y \left(e^{iy^2/4t} - 1 \right) e^{-i(\mathbf{x}\cdot\mathbf{y})/2t} \phi(\mathbf{y}) \\ &= \frac{1}{(2it)^{3/2}} e^{ix^2/4t} \hat{G}_t(\mathbf{x}/2t) \end{aligned} \quad (1.39)$$

ou \hat{G}_t est la transformée Fourier de $G_t(y) = \left(e^{iy^2/4t} - 1 \right) \phi(y)$. Comme la transformation de Fourier laisse la norme invariante (théorème de Plancherel, voir méthode mat. II), nous avons

$$\|\psi(\mathbf{x}, t) - \chi_t(\mathbf{x})\|_{L^2} = \frac{1}{(2t)^{3/2}} \|\hat{G}_t(\cdot/2t)\|_{L^2} = \|\hat{G}_t\|_{L^2} = \|G_t\|_{L^2}. \quad (1.40)$$

Pour estimer la norme de G_t nous utilisons que

$$\left| e^{iy^2/4t} - 1 \right| = \left| \int_0^{y^2/4t} \frac{d}{dx} e^{ix} dx \right| \leq \frac{y^2}{4t}$$

et donc

$$\|G_t\|_{L^2} \leq \frac{1}{4t} \|y^2\phi(y)\|_{L^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0. \quad (1.41)$$

Comme ϕ est dans l'espace de Schwarz $y^2\phi$ est bien en $L^2(\mathbb{R}^3)$. \square

En réintroduisant m et \hbar nous trouvons

$$\boxed{|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \simeq \left(\frac{m}{t}\right)^3 \left|\hat{\phi}(m\mathbf{x}/\hbar t)\right|^2 \text{ pour } t \rightarrow \infty.} \quad (1.42)$$

Comme $\hat{\phi}(\mathbf{k}) = \hat{\phi}(\mathbf{p}/\hbar)$ est la distribution initiale des impulsions (voir interprétation de la fonction d'onde au prochain chapitre), la probabilité de trouver la particule en position \mathbf{x} après le temps t est celle que son impulsion initiale soit $m\mathbf{x}/t$, car initialement le paquet d'onde est très confiné. Alors pour des temps suffisamment grands, une particule libre de la mécanique des ondes se comporte comme une particule classique qui débute à $\mathbf{x} = 0$ avec une distribution des impulsions donnée par $|\hat{\phi}(\mathbf{p}/\hbar)|^2$. Le phénomène de la dissipation de la fonction d'onde apparait ici comme conséquence de la condition de normalisation de la probabilité.

1.3.3 L'équation de Schrödinger

(E. Schrödinger, "An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules" Physical Review. 28 (6) : 1049–1070 (1926).)

Ici nous voulons motiver l'équation de Schrödinger dans une situation avec un potentiel. Ces réflexions ont aussi été importantes pour Schrödinger lui-même. A la fin, bien sûr, seule l'expérience décidera de l'exactitude de cette équation.

Nous décrivons une particule avec une fonction d'onde complexe mais scalaire (plus tard, nous généraliserons ceci pour des particules avec spin), $\psi(\mathbf{x}, t)$. Pour assurer le principe de superposition qui est confirmé expérimentalement (e.g. par le phénomène d'interférence), nous cherchons une équation d'onde linéaire. Formellement nous faisons un ansatz de la forme

$$W\left(\mathbf{x}, \frac{1}{i}\nabla, t, i\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (1.43)$$

Nous supposons que W est un polynôme dans ces arguments. Pour le cas libre

$$W_{\text{libre}} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^2 - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}. \quad (1.44)$$

Pour des champs externes qui changent lentement on trouve que la notion de particule classique donne des très bons résultats. Ceci est comme dans l'optique où, pour des longueurs d'ondes courtes comparées aux dimensions du changement de milieu, on obtient l'optique des raies. Ces démarches vont nous aider à 'deviner' la bonne équation.

Nous supposons une onde qui change lentement de la forme

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{iS(\mathbf{x}, t)}. \quad (1.45)$$

Pour une onde 'presque plane', $S \simeq \mathbf{x} \cdot \mathbf{k} - \omega t$, et les fonctions

$$\mathbf{k} := \nabla S, \quad \omega := -\frac{\partial S}{\partial t} \quad (1.46)$$

sont presque constantes. Nous appelons $\mathbf{k}(\mathbf{x}, t)$ le vecteur d'onde et $\omega(\mathbf{x}, t)$ la fréquence (circulaire). Nous insérons alors (1.46) dans (1.43) et nous négligeons leur dérivées. Ceci donne

$$W(\mathbf{x}, \nabla S, t, \partial_t S) = W(\mathbf{x}, \mathbf{k}, t, \omega) = 0. \quad (1.47)$$

Soit alors $\mathbf{x}(t)$ le centre d'un paquet d'onde. D'après (1.20) sa vitesse est

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}}. \quad (1.48)$$

Ici nous comprenons ω comme fonction de $(\mathbf{x}, t, \mathbf{k})$, c'est-à-dire

$$\omega = \tilde{H}(\mathbf{x}, \mathbf{k}, t). \quad (1.49)$$

En insérant l'expression de S ceci donne

$$\tilde{H}(\mathbf{x}, \nabla S, t) + \partial_t S = 0. \quad (1.50)$$

Ceci n'est rien d'autre que l'équation de Hamilton-Jacobi pour la fonction de Hamilton \tilde{H} . De plus (1.48) donne

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \mathbf{k}}(\mathbf{x}, \nabla S, t). \quad (1.51)$$

Ceci détermine la trajectoire $\mathbf{x}(t)$ pour une fonction S donné. De plus, $\mathbf{k}(t) = \nabla S(\mathbf{x}(t), t)$ satisfait la deuxième equation canonique,

$$\dot{\mathbf{k}} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \mathbf{x}}. \quad (1.52)$$

Ceci est vérifié comme suit : la règle de chaine donne

$$\dot{\mathbf{k}} = \frac{d}{dt} \nabla S(\mathbf{x}(t), t) = \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{x} \partial x_j} \dot{x}_j + \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{x} \partial t} \quad (1.53)$$

D'autre part, le gradient de (1.50) donne

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \mathbf{k}_j} \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{x} \partial x_j} + \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{x} \partial t} = 0. \quad (1.54)$$

Insérant ceci dans (1.53) en utilisant (1.51) donne (1.52). Ceci est exactement comme en mécanique classique, où nous avons

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}}. \quad (1.55)$$

Dans le cas d'un champ électromagnétique avec potentiel magnétique \mathbf{A} et potentiel électrique φ en mécanique classique, le Hamiltonien pour une particule avec charge e est

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A})^2 + e\varphi \quad (1.56)$$

Nous posons $H = \hbar \tilde{H}$ pour obtenir le résultat $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ dans le cas sans champ. Avec ceci, nous avons

$$\hbar \tilde{H} = \frac{1}{2m} (\hbar \mathbf{k} - \frac{e}{c} \mathbf{A})^2 + e\varphi \quad (1.57)$$

et alors

$$W(\mathbf{x}, \mathbf{k}, t, \omega) = \tilde{H} - \omega. \quad (1.58)$$

En remplaçant $\omega \rightarrow i\partial_t$ et $\mathbf{k} = -i\nabla$ nous obtenons l'équation d'onde

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + e\varphi \right] \psi. \quad (1.59)$$

Ceci est l'équation de Schrödinger pour une particule chargée dans un champ électromagnétique. Dans le produit $(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2$, le terme $\nabla\mathbf{A}\psi$ est à comprendre comme $(\nabla\mathbf{A})\psi + \mathbf{A}\nabla\psi$. Ceci ne peut pas être dérivé à partir de notre analogie mais est vérifié expérimentalement.

Cette équation est généralisée pour un Hamiltonien quelconque en

$$\boxed{H\left(\mathbf{x}, \frac{\hbar}{i}\nabla, t\right)\psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t).} \quad (1.60)$$

Ceci est l'équation de Schrödinger générale (dépendante du temps).

Très souvent, le Hamiltonien est de la forme du terme cinétique plus un potentiel $V(\mathbf{x})$. Dans ce cas nous obtenons alors l'équation de Schrödinger

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{x}, t) + V\psi = i\hbar\partial_t\psi.} \quad (1.61)$$

Ici $\Delta = \nabla^2$ est le Laplacien en 3d.

Nous obtenons donc l'équation de Schrödinger en remplaçant dans la fonction de Hamilton classique

$$\boxed{\mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla \equiv \mathbf{p}^{\text{op}}.}$$

Dans cette 'règle de correspondance', le côté droit est l'opérateur d'impulsion. Cet opérateur est bien défini sur les fonctions différentiables qui forme un sous-ensemble dense dans $L^2(\mathbb{R}^3)$, l'espace des fonctions d'onde normalisables.

Du point de vue mathématique il faut en principe démontrer que les opérateurs \mathbf{p}^{op} , \mathbf{A} , φ et H sont auto-adjoints comme c'est le cas pour $i\hbar\partial_t$. Pour ceci il faut faire certaines hypothèses sur les potentiels \mathbf{A} et φ ou V , mais dans ce cours nous ne discutons pas ses subtilités mathématiques qui sont relativement difficiles, mais heureusement ne pas très importantes pour la plupart des applications.

Si H est indépendant du temps on cherche souvent des solutions stationnaires, c'est-à-dire indépendant du temps. Pour ceci on fait l'ansatz

$$\boxed{\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x})e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \quad E \in \mathbb{R}.}$$

En insérant ceci dans (1.60) on trouve

$$\boxed{H\left(\mathbf{x}, \frac{\hbar}{i}\nabla\right)\psi(\mathbf{x}) = E\psi.} \quad (1.62)$$

Ceci est l'équation de Schrödinger indépendante du temps. Si nous considérons $|\psi|^2$ comme une densité de probabilité comme nous allons le proposer dans le prochain chapitre, celle-ci est indépendante du temps.

Dans le prochain chapitre nous discuterons l'interprétation de la fonction d'onde. Ici nous voulons d'abord résoudre l'équation de Schrödinger pour deux exemples très importants.

1.4 L'oscillateur harmonique

La fonction de Hamilton pour un oscillateur harmonique (en 1 dimension) est

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m}{2}\omega^2x^2. \quad (1.63)$$

Nous appliquons $p \rightarrow p^{\text{op}} = \frac{\hbar}{i}\partial_x$. L'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique pour une fonction d'onde $\psi(x, t)$ est alors

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{m}{2}\omega^2x^2\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \quad (1.64)$$

Les coefficients de cette équation ne dépendent pas du temps. Il semble alors judicieux de chercher une solution stationnaire de la forme

$$\psi(x, t) = u(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (1.65)$$

Pour u nous obtenons l'équation différentielle ordinaire

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} + \left(\frac{m}{2}\omega^2x^2 - E\right)u = 0. \quad (1.66)$$

Pour simplifier cette équation nous introduisons les variables sans dimension

$$\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega} \quad \text{et} \quad \eta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x.$$

Pour $u(\eta)$ nous obtenons³ l'équation

$$-u'' + \eta^2u = 2\epsilon u. \quad (1.67)$$

Nous voulons résoudre cette équation avec le bon comportement asymptotique tel que $\int |u|^2 dx = 1$. Donc nous cherchons une solution qui tend vers zéro à l'infini. Quand $|\eta| \rightarrow \infty$, le terme du côté droit de (1.67) peut être négligé et nous avons

$$u''_{\infty} = \eta^2u_{\infty}. \quad (1.68)$$

Cependant, nous voulons trouver une fonction normalisable, donc seulement un exposant négatif est acceptable. Nous faisons alors l'ansatz

$$u(\eta) = e^{-\eta^2/2}w(\eta). \quad (1.69)$$

3. Ici nous commettons un abus de notation en dénommant $\tilde{u}(\eta) = u\left(x = \eta\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right)$ simplement $u(\eta)$.

Nous insérons ceci dans (1.67) ce qui implique

$$w'' - 2\eta w' + (2\epsilon - 1)w = 0. \quad (1.70)$$

Nous proposons une série de puissances

$$w = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \eta^k. \quad (1.71)$$

L'équation différentielle (1.70) implique une formule de récursion pour $k \in \mathbb{N}$ donnée par

$$(k+2)(k+1)a_{k+2} - 2ka_k + (2\epsilon - 1)a_k = 0 \quad (1.72)$$

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-2\epsilon}{(k+2)(k+1)} a_k. \quad (1.73)$$

Si la suite ne se termine pas, c'est-à-dire $\epsilon \neq k + 1/2$ pour tout $k \in \mathbb{N}$, alors $a_{k+2} \simeq (2/k)a_k$. Ceci implique que pour grand η nous avons $w \sim \exp(\eta^2)$ et donc $u \sim \exp(\eta^2/2)$, ce qui est la solution que nous voulons écarter. Nous imposons alors que

$$\epsilon = n + \frac{1}{2}, \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (1.74)$$

Si n est pair nous pouvons demander que les coefficients impairs soient nuls, et si n est impair nous demandons que les coefficients pair soient nulle. Pour $\epsilon = n + 1/2$ alors $w(\eta)$ est un polynôme de degré n qui est pair si n est pair et impair si n est impair. Nous l'appelons $H_n(\eta)$. Avec ceci nous obtenons

$$u_n(\eta) = C_n e^{-\eta^2/2} H_n(\eta). \quad (1.75)$$

et nous allons choisir la constante C_n telle que u_n soit normalisée.

Pour $n = 0$,

$$u_0(\eta) = C_0 e^{-\eta^2/2}. \quad (1.76)$$

La normalisation de u_0 requiert $C_0 = \pi^{-1/4}$.

Par une simple procédure algébrique nous déterminons alors les fonctions H_n et les constantes de normalisation C_n . Pour ceci nous considérons le sous-espace suivant de $L^2(\mathbb{R})$,

$$\mathcal{D} = \left\{ e^{-\eta^2/2} p(\eta) \mid p \text{ est un polynôme en } \eta \right\}. \quad (1.77)$$

Nous savons que $u_n \in \mathcal{D}$. De plus, \mathcal{D} est invariant sous les opérateurs η et $d/d\eta$ (exercice : demontrez cela!) et donc aussi sous

$$D_{\pm} = \eta \mp \frac{d}{d\eta}. \quad (1.78)$$

Pour une fonction (deux fois différentiable) f on trouve

$$D_+D_-f = -\frac{d^2f}{d\eta^2} + \eta^2f - f \quad (1.79)$$

$$D_-D_+f = -\frac{d^2f}{d\eta^2} + \eta^2f + f, \quad (1.80)$$

donc

$$D_-D_+ - D_+D_- = 2 \quad (1.81)$$

Notez que ceci est une équation entre opérateurs, c'est-à-dire $(D_-D_+ - D_+D_-)f = 2f$. Notre équation différentielle (1.67) pour u peut être écrite comme

$$D_+D_-u = (2\epsilon - 1)u, \quad (1.82)$$

en particulier

$$\boxed{D_+D_-u_n = 2nu_n.} \quad (1.83)$$

C'est-à-dire, u_n est vecteur propre de l'opérateur D_+D_- avec valeur propre $2n$.

Nous montrons alors que D_+u_n est aussi vecteur propre de D_+D_- avec valeur propre $2n + 2$, en effet on a

$$\boxed{D_+D_-(D_+u_n) = D_+(D_+D_- + 2)u_n = D_+(2n + 2)u_n = (2n + 2)D_+u_n.} \quad (1.84)$$

Il faut encore vérifier que $D_+u_n \neq 0$. Pour ceci nous introduisons le produit scalaire suivant sur \mathcal{D} ,

$$\langle u, v \rangle = \int_{\mathbb{R}} \bar{u}(\eta)v(\eta)d\eta \quad (1.85)$$

Il est facile de voir par intégration partielle que D_- est l'adjoint de D_+ , c'est-à-dire

$$\langle u, D_+v \rangle = \langle D_-u, v \rangle. \quad (1.86)$$

Pour la norme carrée de D_+u_n ceci implique

$$\langle D_+u_n, D_+u_n \rangle = \langle u_n, D_-D_+u_n \rangle = \langle u_n, (D_+D_- + 2)u_n \rangle = 2(n+1)\langle u_n, u_n \rangle \neq 0, \quad (1.87)$$

car $u_n \neq 0$. A partir de u_0 nous pouvons donc construire u_n par action successive de D_+ . Nous voulons aussi que les fonctions d'onde u_n soient normalisées. Pour ceci nous choisissons

$$\boxed{u_0 = \pi^{-1/4}e^{-\eta^2/2},} \quad (1.88)$$

et

$$\boxed{u_n(\eta) = \frac{\pi^{-1/4}}{2^{n/2}\sqrt{n!}} D_+^n \left(e^{-\eta^2/2} \right)}. \quad (1.89)$$

Ceci sont des solutions normalisées, $\|u_n\| = 1$, et réelles de (1.83). Il est facile à vérifier que

$$D_+ f = e^{\eta^2/2} \left(-\frac{d}{d\eta} \right) e^{-\eta^2/2} f.$$

Avec la définition des polynômes

$$H_n(\eta) = e^{\eta^2} \left(-\frac{d}{d\eta} \right)^n e^{-\eta^2}, \quad (1.90)$$

nous obtenons donc

$$\boxed{u_n(\eta) = \frac{\pi^{-1/4}}{2^{n/2}\sqrt{n!}} e^{-\eta^2/2} H_n(\eta)}. \quad (1.91)$$

Nous voulons discuter un peu plus en détail les polynômes H_n dites *polynômes de Hermite*.

Le terme $\left(-\frac{d}{d\eta} \right)^n e^{-\eta^2}$ est, à un facteur $(-1)^n n!$ près, le n -ième coefficient de la série de Taylor de $e^{-\eta^2}$. D'après le théorème de Cauchy, nous avons donc

$$H_n(\eta) = e^{\eta^2} (-1)^n n! \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{e^{-z^2}}{(z-\eta)^{n+1}} dz. \quad (1.92)$$

Ici C est un chemin fermé dans le plan complexe qui tourne une fois autour de η (dans le sens contraire des aiguilles d'une montre).

La fonction génératrice des H_n est définie par

$$\Phi(\eta, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(\eta). \quad (1.93)$$

Avec l'expression pour H_n donnée par (1.92) elle vaut

$$\Phi(\eta, t) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C e^{\eta^2 - z^2} \frac{1}{(z-\eta)} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-t}{z-\eta} \right)^n dz. \quad (1.94)$$

La somme est de la forme $\sum x^n = 1/(1-x)$ avec $x = -t/(z-\eta)$. Elle donne alors $(z-\eta)/(z-\eta+t)$. Avec ceci

$$\Phi(\eta, t) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C e^{\eta^2 - z^2} \frac{1}{z - (\eta - t)} dz = e^{\eta^2} e^{-(\eta-t)^2} = e^{-t^2 + 2t\eta}. \quad (1.95)$$

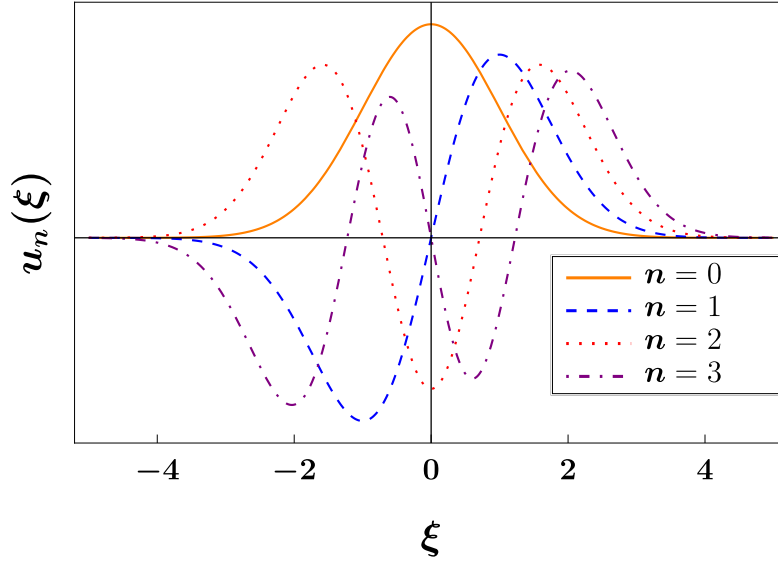


FIGURE 1.4 – Les fonctions d’onde de l’oscillateur harmonique, u_0 , u_1 , u_2 et u_3 comme fonctions de $\eta = \sqrt{m\omega/\hbar}x$. (Figure de J. Francfort)

Les fonctions d’onde propre, u_n sont orthonormées :

$$\langle u_m, u_n \rangle = \delta_{mn}. \quad (1.96)$$

Pour $m = n$ ceci est vrai par construction. Pour $m \neq n$ nous utilisons l’équation (1.67) qui donne $-u_n'' + \eta^2 u_n = (2n + 1)u_n$, et donc

$$\frac{d}{d\eta}(u_n' u_m - u_m' u_n) = u_n'' u_m - u_m'' u_n = 2(m - n)u_n u_m. \quad (1.97)$$

Comme les fonctions u_n sont réelles cela implique

$$2(m - n)\langle u_n u_m \rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{d}{d\eta}(u_n' u_m - u_m' u_n) d\eta = 0. \quad (1.98)$$

Les fonctions d’ondes de basse harmonique sont montrées dans la fig. 1.4. Notez que u_n a n zéros (noeuds). En effet, les fonctions $(u_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ forment une base de $L^2(\mathbb{R})$. Pour montrer ceci il faut encore montrer qu’elles forment un ensemble complet. C’est-à-dire si pour une fonction $f \in L^2(\mathbb{R})$, $\langle f, u_n \rangle = 0 \forall n \in \mathbb{N}_0$ alors $f \equiv 0$ (comme fonction dans $L^2(\mathbb{R})$).

Preuve. Nous supposons que $\langle f, u_n \rangle = 0 \forall n \in \mathbb{N}_0$. Introduisons

$$F(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \exp(-izx - x^2/2) f(x) dx. \quad (1.99)$$

$u_0(\eta)$	$\pi^{-1/4} \exp(-\eta^2/2)$
$u_1(\eta)$	$\sqrt{2}\pi^{-1/4}\eta \exp(-\eta^2/2)$
$u_2(\eta)$	$\frac{\pi^{-1/4}}{2\sqrt{2}}(4\eta^2 - 2) \exp(-\eta^2/2)$
$u_3(\eta)$	$\frac{\pi^{-1/4}}{4\sqrt{3}}(8\eta^3 - 12\eta) \exp(-\eta^2/2)$
$u_4(\eta)$	$\frac{\pi^{-1/4}}{8\sqrt{6}}(16\eta^4 - 48\eta^2 + 12) \exp(-\eta^2/2)$
$u_5(\eta)$	$\frac{\pi^{-1/4}}{8\sqrt{60}}(32\eta^5 - 160\eta^3 + 120\eta) \exp(-\eta^2/2)$

TABLE 1.1 – Les fonctions d’onde de l’oscillateur harmonique, u_0, u_1, u_2, u_3, u_4 et u_5 comme fonctions de $\eta = \sqrt{m\omega/\hbar}x$.

Cette fonction est bien définie et analytique dans tout le plan complexe. Sa n -ième dérivée est

$$F^{(n)}(z) = \frac{(-i)^n}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} x^n \exp(-izx - x^2/2) f(x) dx.$$

Pour $z = 0$, ceci implique

$$F^{(n)}(0) = \frac{(-i)^n}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} x^n \exp(-x^2/2) f(x) dx = 0,$$

car les u_n engendrent toutes les fonctions de la forme $x^n \exp(-x^2/2)$. Comme F est analytique il suit que $F(z) = 0 \forall z \in \mathbb{C}$. Pour $z \in \mathbb{R}$ ceci implique que la transformée de Fourier de $\exp(-x^2/2) f(x)$ est nulle. Il suit donc que aussi $\exp(-x^2/2) f(x) = 0$ (presque partout), et alors $f \equiv 0$ (comme fonction sur $L^2(\mathbb{R})$). \square

Le Hamiltonien de l’oscillateur harmonique peut aussi être écrit comme

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (D_+ D_- + 1). \quad (1.100)$$

Avec un spectre purement discret donné par

$$E_n = \hbar\omega\epsilon_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.101)$$

On appelle aussi les fonction u_n des ‘fonctions propres’ ou des ‘vecteurs propres’ du Hamiltonien H avec des valeurs propres ou ‘énergies propres’ E_n .

Comme les u_n forment une base, toute fonction $u \in L^2(\mathbb{R})$ est de la forme

$$u(x) = \sum_n c_n u_n(x).$$

Si une fonction d'onde est de la forme $u(x)$ à $t = 0$ la solution de l'équation de Schrödinger est alors (prouvez-le)

$$\boxed{\psi(x, t) = \sum_n c_n u_n(x) e^{-itE_n/\hbar}.} \quad (1.102)$$

Le terme $\hbar\omega/2 = E_0$ est l'énergie de l'état fondamental. Il est un peu étrange qu'elle ne vaille pas zéro. Ceci est une conséquence du fait que, dans la transition de la mécanique classique et la mécanique quantique, l'ordre des opérateurs n'est pas déterminé. A partir de $H_{cl} = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$ nous avons trouvé l'expression (1.100) pour le Hamiltonien quantique avec des solution u_n avec des énergies $\omega\hbar(n + 1/2)$. Mais en mécanique classique nous pouvons aussi écrire

$$H_{cl} = \frac{1}{2m} (p^2 + m^2\omega^2 x^2) = \frac{1}{2m} (m\omega x + ip)(m\omega x - ip). \quad (1.103)$$

Avec notre règle de correspondance et la définition de D_{\pm} la deuxième expression se traduit en mécanique quantique comme

$$H^{(1)} = \frac{\hbar\omega}{2} D_- D_+ = \frac{\hbar\omega}{2} (D_+ D_- + 2), \quad (1.104)$$

Avec les mêmes fonctions propres que H , ais avec les énergies propres $E_n^{(1)} = \hbar\omega(n + 1)$. Par contre, si nous écrivons le Hamiltonien classique comme $H = (m\omega x - ip)(m\omega x + ip)$, ce qui est équivalent en physique classique, la règle de correspondance donne pour le Hamiltonien quantique

$$H^{(2)} = \frac{\hbar\omega}{2} D_+ D_- = H - \frac{\hbar\omega}{2} \quad (1.105)$$

avec énerieuses propres $E_n^{(2)} = n\hbar\omega$ et l'énergie de l'état fondamental disparaît.

Aussi longtemps que nous négligeons la gravité, ce qui est une bonne approximation pour la plupart des phénomènes quantiques, seules des différences d'énergies, $(E_m - E_n)$ sont importantes, et elles ne dépendent pas de cette subtilité. En revanche, les effets de l'énergie de l'état fondamental qui peut changer en fonction de la configuration est réelle et elle a été mesurée, par exemple dans l'effet Casimir (voir Mécanique Quantique II). Ceci a montré que H est la bonne forme pour le Hamiltonien quantique de l'oscillateur harmonique.

1.4.1 Une solution générale de l'équation Schrödinger dépendante du temps

Dans la section précédente nous avons trouvé toutes les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour l'oscillateur harmonique, les fonctions $u_n(x)$. Nous avons démontré que ces fonctions forment une base orthonormée de $L^2(\mathbb{R})$.

Nous supposons alors le cas général avec un Hamiltonien H qui a des solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps de la forme $\phi_n(x)$ avec des énergies $E_n \in \mathbb{R}$.

$$H\phi_n(x) = E_n\phi_n(x). \quad (1.106)$$

Nous supposons que ces solutions avec un spectre discret d'énergies E_n comprennent toutes les solutions. (Ceci n'est pas toujours le cas. Il est vrai pour l'oscillateur harmonique et pour tout espace de Hilbert de dimension finie. Mais ce n'est pas le cas pour l'atome d'hydrogène que nous discuterons dans la section suivante.) Dans ce cas, on peut démontrer que, en toute généralité, les fonctions $\phi_n(x)$ forment une base de l'espace de Hilbert qu'on peut choisir orthonormée. Les fonctions

$$\psi_n(x, t) = \phi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar) \quad (1.107)$$

sont alors des solutions de l'équation de Schrödinger dépendantes du temps,

$$i\hbar\partial_t\psi_n(x, t) = H\psi_n(x, t), \quad (1.108)$$

avec condition initiale $\psi_n(x, 0) = \phi_n(x)$. Nous considérons maintenant une condition initiale $\Phi(x)$ générale. Comme les ϕ_n forment une base, nous pouvons écrire

$$\Phi(x) = \sum_n \alpha_n \phi_n(x), \quad (1.109)$$

avec des coefficients $\alpha_n \in \mathbb{C}$. Les coefficients α_n sont déterminés par

$$\langle \phi_m, \Phi \rangle = \sum_n \alpha_n \langle \phi_m, \phi_n \rangle = \sum_n \alpha_n \delta_{mn} = \alpha_m. \quad (1.110)$$

Exercice : Montrer que la normalisation des ϕ_n et de Ψ requiert $\sum_n |\alpha_n|^2 = 1$.

Comme l'équation de Schrödinger est linéaire, la solution d'une combinaison linéaire de conditions initiales est la combinaison linéaire des solutions. Nous trouvons donc que

$$\Psi(x, t) = \sum_n \alpha_n \phi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar) \quad (1.111)$$

est la solution générale de l'équation Schrödinger avec condition initiale $\Psi(x, 0) = \Phi(x)$.

Tout ceci est assez évident mais peut être très utile surtout dans les exercices ou nous étudierons souvent des cas de dimension finie.

1.5 L'atome d'hydrogène

Dans cette section nous calculons le spectre de l'atome d'hydrogène avec l'équation de Schrödinger et en négligeant le spin que nous introduirons plus tard. Nous allons trouver ledit 'spectre de Balmer' qui a été découvert au 19ème siècle. Contrairement à l'oscillateur harmonique le Hamiltonien de l'atome d'hydrogène a aussi un spectre continu avec des énergies positives. Nous ne discutons pas ces états (dits de diffusion) dans ce cours.

Nous considérons un électron dans le champ électrique d'un noyau de Z protons et donc de charge Ze . Le potentiel est donc

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (1.112)$$

Comme en mécanique classique (voir Mécanique II), on peut prendre en compte le mouvement du noyau en remplaçant la masse de l'électron par la masse réduite. L'équation de Schrödinger pour une solution stationnaire, donnée par

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x})e^{-itE/\hbar},$$

est

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|} \right] \psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}). \quad (1.113)$$

Il est utile d'introduire des unités atomiques,

$$\text{longueur : } a = \frac{\hbar^2}{Ze^2m} = \frac{1}{Z}a_B, \quad (1.114)$$

$$\text{rayon de Bohr : } a_B \simeq 5.2618 \times 10^{-9} \text{cm}, \quad (1.115)$$

$$\text{énergie : } \frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2} = \frac{Ze^2}{2a} = Z^2\text{Ry}, \quad (1.116)$$

$$\begin{aligned} \text{Rydberg : } \text{Ry} &\simeq 13.60569\text{eV} \simeq 2.17987 \times 10^{-18}\text{J} \\ &= 2.17987 \times 10^{-11}\text{erg}. \end{aligned} \quad (1.117)$$

Nous posons alors

$$\mathbf{x} = a\mathbf{r}, \quad E = \frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2}\epsilon. \quad (1.118)$$

Les quantités \mathbf{r} et ϵ sont alors adimensionnelles. Avec ceci, l'équation de Schrödinger devient

$$\left(\Delta_{\mathbf{r}} + \frac{2}{r} + \epsilon\right) \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (1.119)$$

Nous introduisons les coordonnées sphériques,

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= r(\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta), \\ 0 &\leq \vartheta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi. \end{aligned} \quad (1.120)$$

Le laplacien devient (voir méthodes mathématiques I ou électrodynamique I)

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda, \quad (1.121)$$

avec

$$\Lambda = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (1.122)$$

Ici Λ est le laplacien sur la sphère. Avec l'ansatz produit,

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi),$$

nous obtenons

$$\frac{r^2}{R} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R + 2r + r^2 \epsilon = -\frac{1}{Y} \Lambda Y.$$

Comme le coté gauche ne dépend que de r et celui de droite que de (ϑ, φ) ils doivent les deux être constants. Nous faisons alors l'ansatz

$$\Lambda Y = -\lambda Y. \quad (1.123)$$

Dans l'appendice A.2 (voir aussi méthodes mathématique I), nous démontrons que l'équation (1.123) n'a des solutions que pour $\lambda = \ell(\ell + 1)$ et pour tout $\ell \in \mathbb{N}_0$ cette équation a $2\ell + 1$ solutions, les harmoniques sphériques $Y_{\ell m}$ avec $m \in \{-\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell\}$ qui forment une base orthonormée de fonctions sur la sphère.

La fonction d'onde radiale satisfait alors l'équation

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} R + \frac{2}{r} R + \epsilon R = 0. \quad (1.124)$$

Les coefficients de cette équation différentielle sont singuliers à $r = 0$. Pour trouver une solution régulière à $r = 0$, nous essayons un ansatz de la forme

$$R(r) = r^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k, \quad a_0 \neq 0. \quad (1.125)$$

Pour que le pré-facteur r^s soit unique nous imposons $a_0 \neq 0$. Dans l'éq. différentielle (1.124), ceci donne

$$[s(s+1) - \ell(\ell+1)]a_0 r^{s-2} + [(s+1)(s+2) - \ell(\ell+1)]a_1 + 2a_0) r^{s-1} + r^s \sum_{k=0}^{\infty} ([(k+s+2)(k+s+3) - \ell(\ell+1)]a_{k+2} + 2a_{k+1} + \epsilon a_k) r^k = 0. \quad (1.126)$$

Comme chaque terme doit disparaître, il suit

$$s(s+1) = \ell(\ell+1). \quad (1.127)$$

La régularité de la solution à $r = 0$ impose $s \geq 0$ donc

$$s = \ell \quad (1.128)$$

Ceci donne

$$a_1 = \frac{-1}{\ell+1} a_0, \quad (1.129)$$

$$a_{k+2} = \frac{-1}{(k+2)(k+2\ell+3)} (2a_{k+1} + \epsilon a_k), \quad k \geq 0. \quad (1.130)$$

Pour simplifier le problème nous allons examiner le comportement de R pour $r \rightarrow \infty$, comme pour l'oscillateur harmonique. Dans ce cas nous trouvons que les termes dominants pour $r \rightarrow \infty$ donnent

$$\frac{d^2 R_\infty}{dr^2} + \epsilon R_\infty = 0. \quad (1.131)$$

Ceci implique

$$R_\infty(r) = \alpha_1 e^{\sqrt{-\epsilon}r} + \alpha_2 e^{-\sqrt{-\epsilon}r} \quad (1.132)$$

Ici nous distinguons deux possibilités :

- (a) $\epsilon < 0$ (b) $\epsilon \geq 0$.

Nous considérons ici le cas (a). Ce sont les états liés. Le cas (b) décrit des états de diffusion que nous ne considérons pas ici. Comme nous demandons que la fonction d'onde soit normalisable, nous posons $\alpha_1 = 0$. Comme nous le verrons ceci va limiter les valeurs possibles de ϵ . Nous posons

$$n = \frac{1}{\sqrt{-\epsilon}} > 0, \quad \rho = 2\sqrt{-\epsilon}r = \frac{2}{n}r. \quad (1.133)$$

En considérant R comme fonction de ρ l'équation de Schrödinger radiale devient

$$R'' + \frac{2}{\rho}R' + \left(\frac{n}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) R = 0. \quad (1.134)$$

Ici une prime indique une dérivée par rapport à ρ .

En prenant en compte nos considérations ci-dessus, nous faisons l'ansatz

$$R(\rho) = e^{-\rho/2} \rho^\ell w(\rho). \quad (1.135)$$

Nous insérons ceci dans (1.134) et trouvons

$$\rho w'' + (2\ell + 2 - \rho)w' + (n - \ell - 1)w = 0. \quad (1.136)$$

Cette équation est de la forme

$$\rho w'' + (\gamma - \rho)w' - \alpha w = 0, \quad (1.137)$$

avec $\gamma = 2(\ell + 1)$ et $\alpha = \ell + 1 - n$. L'équation (1.137) est l'équation différentielle *confluente hypergéométrique*. Nous faisons un ansatz en série de puissances pour w ,

$$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k. \quad (1.138)$$

L'éq. (1.137) implique

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(k+1)(k+\gamma)a_{k+1} - (k+\alpha)a_k] \rho^k = 0. \quad (1.139)$$

Chaque terme doit être nul, ce qui donne la formule de récurrence

$$a_{k+1} = \frac{k+\alpha}{(k+1)(k+\gamma)} a_k, \quad \text{donc} \quad (1.140)$$

$$a_k = \frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+k-1)}{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+k-1)} \frac{1}{k!} a_0. \quad (1.141)$$

La série,

$$F(\alpha, \gamma; \rho) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+k-1)}{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+k-1)} \frac{1}{k!} \rho^k \quad (1.142)$$

s'appelle *série hypergéométrique confluente*. Elle est bien définie (une fonction entière) pour tout $\gamma \notin \{0, -1, -2, \dots\}$. Pour $\alpha \in \{0, -1, -2, \dots\}$, $\alpha = -m$, $m \in \mathbb{N}_0$ elle se termine à $k = m$ et devient un polynôme de degré m . Pour $\gamma \in \mathbb{N}$ ce polynôme est lié aux polynômes de Laguerre via (voir Appendice A.3)

$$F(-m, k+1, z) = \frac{m!}{(k+1)\cdots(k+m)} L_m^k(z) = \binom{k+m}{m}^{-1} L_m^k(z). \quad (1.143)$$

Si $n - \ell - 1 \in \mathbb{N}_0$, F est un polynôme et R est normalisable. Nous voulons montrer que dans le cas contraire, R n'est pas normalisable. Pour ceci nous regardons la formule de récurrence (1.140) qui implique que pour grand k

$$a_{k+1} \sim \frac{1}{k+1} a_k.$$

Ceci implique que pour grand ρ , $w \sim \exp(\rho)$ et donc $R \propto e^{-\rho/2} w$ n'est pas normalisable. Pour la fonction d'onde radiale nous demandons alors que $m = n - \ell - 1 \in \mathbb{N}_0$. Avec ceci

$$\begin{aligned} R(\rho) &\propto a_0 e^{-\rho/2} \rho^\ell F(\ell + 1 - n, 2\ell + 2, \rho) \\ &= a_0 e^{-\rho/2} \frac{(n - \ell - 1)!(2\ell + 2)!}{(n + \ell + 1)!} L_{n - \ell - 1}^{2\ell + 1}(\rho) \\ &= C_{n\ell} \rho^\ell e^{-\rho/2} L_{n - \ell - 1}^{2\ell + 1}(\rho). \end{aligned} \quad (1.144)$$

Nous choisirons la constante $C_{n\ell}$ telle que la fonction d'onde soit normalisée. Nous concluons que pour une fonction d'onde physique il faut que $n \in \mathbb{N}$ et $n \geq \ell + 1$. Les valeurs possibles de l'énergie sont alors 'quantifiées' et données par

$$\boxed{\epsilon = -\frac{1}{n^2}, \quad E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \text{Ry}, \quad n \in \mathbb{N}.} \quad (1.145)$$

La fonction d'onde radiale est

$$\boxed{R_{n\ell} = C_{n\ell} e^{-r/n} \left(\frac{2r}{n}\right)^\ell L_{n - \ell - 1}^{2\ell + 1}(2r/n), \quad \ell \in \{0, 1, \dots, n - 1\},} \quad (1.146)$$

où $C_{n\ell}$ est une constante de normalisation. Introduisant aussi la dépendance angulaire nous obtenons les fonctions d'onde pour l'atome d'hydrogène,

$$\boxed{\psi_{n\ell m}(r, \vartheta, \varphi) = C_{n\ell} e^{-r/n} \left(\frac{2r}{n}\right)^\ell L_{n - \ell - 1}^{2\ell + 1}\left(\frac{2r}{n}\right) \times Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi).} \quad (1.147)$$

Dans l'appendice A.3 nous déterminons aussi les constantes de normalisation, qui sont

$$C_{n\ell} = \frac{2}{a^{3/2} n^2} \sqrt{\frac{(n - \ell - 1)!}{[(n + \ell)!]^3}} \quad (1.148)$$

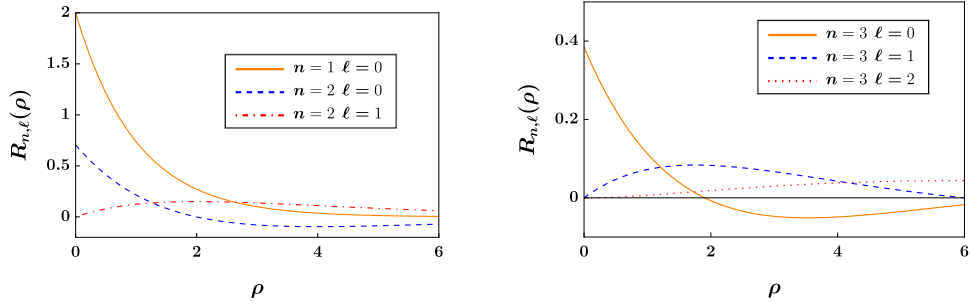


FIGURE 1.5 – Les fonctions d’onde radiales, $R_{n\ell}$ de l’hydrogène pour $n = 1, 2$ et 3 et $\ell < n$ comme fonctions de $\rho = 2|\mathbf{x}|/(na)$. (Figure de J. Francfort)

Dans l’appendice A.3 nous démontrons aussi que les polynômes de Laguerre satisfont la condition d’orthogonalité suivante,

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2\ell+2} L_p^{2\ell+1} L_q^{2\ell+1} d\rho = \frac{[(p+2\ell+1)!]^3}{p!} \delta_{pq}. \quad (1.149)$$

Avec ceci les fonctions d’ondes sont orthonormées, c’est-à-dire

$$\int \psi_{n\ell m}(\mathbf{x}) \bar{\psi}_{n'\ell'm'}(\mathbf{x}) d^3x = \delta_{nn'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}. \quad (1.150)$$

Pour la partie angulaire nous démontrons ceci dans l’appendice A.2 tandis que la normalisation de la fonction d’one radiale est dérivée dans l’appendice A.3. Pour n fixé l’énergie est fixée pour tous les états (n, ℓ, m) avec $\ell < n$ et $-\ell \leq m \leq \ell$. Il existe alors

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = 2n(n-1)/2 + n = n^2 \quad (1.151)$$

états de la même énergie E_n . L’énergie E_n est donc n^2 fois dégénérée, voir fig. 1.6. L’origine de cette dégénérescence est liée aux symétries du problème ; nous le discuterons plus tard.

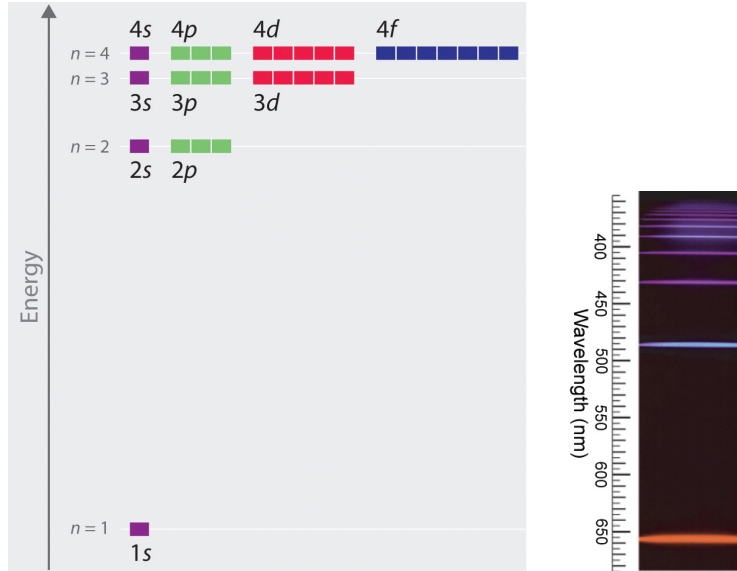


FIGURE 1.6 – Le spectre de l’atome d’hydrogène ($\ell = 0(s), 1(p), 2(d), 3(f)$).
(source : chem.libretexts.org)

$R_{10}(\rho)$	$a^{-3/2}2 \exp(-\rho)$
$R_{20}(\rho)$	$\frac{1}{a^{3/2}2\sqrt{6}}\rho \exp(-\rho/2)$
$R_{21}(\rho)$	$\frac{1}{a^{3/2}2\sqrt{2}}(\rho - 2) \exp(-\rho/2)$
$R_{30}(\rho)$	$\frac{2}{a^{3/2}81\sqrt{3}}(2\rho^2 - 18\rho - 27) \exp(-\rho/3)$
$R_{31}(\rho)$	$-\frac{2}{a^{3/2}81}\sqrt{\frac{2}{3}}(\rho^2 - 6\rho) \exp(-\rho/3)$
$R_{32}(\rho)$	$\frac{2}{a^{3/2}81}\sqrt{\frac{2}{15}}\rho^2 \exp(-\rho/3)$

TABLE 1.2 – Quelques fonctions d’onde radiales, de l’atome d’hydrogène, $R_{10}, R_{20}, R_{21}, R_{30}, R_{31}$ et R_{32} comme fonctions de $\rho = 2|\mathbf{x}|/(na)$, $a = a_B/Z$.

Chapitre 2

Interprétation de la fonction d'onde

L'interprétation de la fonction d'onde nous montre à nouveau l'étrangeté de la mécanique quantique. Dans le chapitre précédent nous avons dérivé une équation d'évolution pour la fonction d'onde, l'équation de Schrödinger. Pour des conditions initiales données, nous pouvons la calculer de façon déterministe pour tout temps. Par contre, reste la question comment il faut interpréter cette fonction d'onde ?

Ceci est jusqu'à présent un sujet discuté intensément et nous ne voulons pas entrer dans les détails. Nous suivons l'interprétation dite 'de Copenhague' qui est une des premières et qui décrit les phénomènes parfaitement. Cette interprétation a été élaborée surtout par Max Born, Nils Bohr et Werner Heisenberg. Nous allons quand même discuter ce qui est bizarre. D'autres interprétations sont la 'many worlds interpretation' ou la 'consistent histories interpretation' ainsi que la théorie de de Broglie-Bohm ou théorie de l'onde pilot et d'autres.

On pourrait d'abord comprendre la fonction d'onde comme un champ classique. Comme par exemple les champs électrique et magnétique. L'équation de Schrödinger décrirait alors la propagation d'ondes d'électrons. Une telle interprétation est motivée par le fait que l'équation de Schrödinger implique une équation de continuité. En effet, en posant

$$\rho = e\psi\bar{\psi} \quad \text{et} \quad (2.1)$$

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar e}{2mi} [\bar{\psi}\nabla\psi - \psi\nabla\bar{\psi}] - \frac{e^2}{mc}\psi\bar{\psi}\mathbf{A}, \quad (2.2)$$

il suit de l'équation d'onde (1.59)

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (2.3)$$

le surligné indique le complexe conjugué. On pourrait donc interpréter ρ comme une densité de charge et \mathbf{J} comme le courant de charge.

Par contre, cette interprétation n'est pas compatible tout d'abord parce qu'elle abandonne la notion de particule et donc dans un volume de faible densité il devrait en principe être possible de mesurer une charge totale inférieure à $1e$. Ceci ne s'est encore jamais produite. En regardant l'expérience de la double fente, nous voyons qu'au début, quand l'intensité sur l'écran est encore faible, nous trouvons un nombre faible de points individuels, ce qui indique que les électrons arrivent individuellement sur l'écran à cette position, et nous ne voyons pas une figure d'interférence à faible intensité.

Aussi d'un point de vue théorique on s'attendrait à une auto-interaction du champ ce qui ajouterait des termes non-linéaires à l'équation de Schrödinger. Le principe de superposition ne serait donc plus valable, ce qui détruirait l'interférence si clairement observée.

2.1 Interprétation statistique de la fonction d'onde

Ceci nous mène à une interprétation probabiliste de la fonction d'onde : la quantité $|\psi|^2$ est une densité de probabilité. Si ψ est notre solution de l'équation de Schrödinger pour un électron, la probabilité de trouver cet électron dans un volume Δ est

$$W_\psi(\Delta) = \int_\Delta |\psi(\mathbf{x})|^2 d^3x. \quad (2.4)$$

Pour cette raison, la fonction d'onde doit être normalisée :

$$1 = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x})|^2 d^3x. \quad (2.5)$$

L'équation de continuité (2.3) assure que cette normalisation est conservée :

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x})|^2 d^3x = \int_{\mathbb{R}^3} \partial_t |\psi(\mathbf{x})|^2 d^3x = -\frac{1}{e} \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \cdot \mathbf{J} d^3x = 0. \quad (2.6)$$

Pour le dernier signe d'égalité nous avons utilisé le théorème de Gauss et le fait que le courant décroît pour $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ si la fonction d'onde est normalisable, se que nous supposons.

Une fonction d'onde doit alors être "carré-intégrable", c'est-à-dire, $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Pour deux fonctions $\psi, \phi \in L^2(\mathbb{R}^3)$, nous pouvons définir un produit scalaire via

$$\langle \psi, \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})d^3x. \quad (2.7)$$

L'espace $L^2(\mathbb{R}^3)$ est un espace vectoriel complexe avec un produit scalaire. Un tel espace est appelé un 'espace de Hilbert'. Dans le cas de dimension infinie comme pour $L^2(\mathbb{R}^3)$ on impose encore que l'espace soit 'complet' c'est-à-dire que toute série de Cauchy soit convergente.

2.2 Plusieurs particules

Avec cette interprétation statistique il est facile de généraliser le formalisme de la fonction d'onde et l'équation de Schrödinger à plusieurs particules. La fonction d'onde dépend alors des positions des N particules,

$$\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, t)$$

et sa valeur absolue au carré, $|\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, t)|^2$ est la densité de probabilité que la première particule se trouve à \mathbf{x}_1 , la deuxième à $\mathbf{x}_2 \dots$ et la N -ième à \mathbf{x}_N au moment t . L'équation de Schrödinger est obtenue à partir du Hamiltonien classique en remplaçant

$$\mathbf{p}_j \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla_j,$$

ce qui est la règle de correspondance. Nous négligeons ici les questions de domaine de définition : les fonctions carré-intégrables ne sont pas tous différentiables, mais les fonctions différentiables dans $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ forment un ensemble dense dans $L^2(\mathbb{R}^{3N})$.

Avec la règle de correspondance, H devient un opérateur sur $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ qui est défini sur un sous-ensemble dense de $L^2(\mathbb{R}^{3N})$. Un opérateur A est appelé 'symétrique' si

$$\langle \psi, A\phi \rangle = \langle A\psi, \phi \rangle \quad (2.8)$$

pour tout $\psi, \phi \in L^2(\mathbb{R}^{3N})$ tels que les deux côtés de (2.8) soient bien définis. Pour un opérateur A quelconque on définit son adjoint (ou hermitien conjugué) A^* par

$$\boxed{\langle \psi, A\phi \rangle = \langle A^*\psi, \phi \rangle} \quad (2.9)$$

pour tout $\phi \in L^2(\mathbb{R}^{3N})$ tel que $A\phi$ est bien défini. Le domaine de définition de A^* sont les états ψ pour lesquels une telle relation existe pour tout ϕ dans le domaine de définition de A .

Un opérateur est appelé *auto-adjoint* si il est égal à son adjoint (c'est-à-dire si A^* a le même domaine de définition que A et s'il est symétrique dans ce domaine). Si et seulement si H est auto-adjoint, la normalisation est conservée et l'interprétation probabiliste fait du sens :

$$\partial_t |\psi|^2 = \frac{1}{i\hbar} [\bar{\psi} H \psi - (H \bar{\psi}) \psi], \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \|\psi\|^2 &= \frac{1}{i\hbar} \int [\bar{\psi} H \psi - \overline{H \bar{\psi} \psi}] d^{3N} x \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\langle \psi, H \psi \rangle - \langle H \psi, \psi \rangle] = 0. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Dans le dernier signe d'égalité nous avons utilisé que H est symétrique. Ceci est normalement facile à voir. Le fait que H est aussi auto-adjoint est plus difficile à démontrer en général, mais la question du domaine de définition n'est pas étudiée dans ce cours et nous la mettons de côté.

La règle de correspondance ne détermine pas uniquement l'opérateur de Hamilton. Par exemple en mécanique classique

$$p^2 = O_1(p, q) = \frac{1}{q^2} p q^4 p \frac{1}{q^2} = O_2(p, q).$$

Par contre si nous remplaçons $p \rightarrow (\hbar/i)\partial_q$ des deux côtés, nous obtenons deux opérateurs différents,

$$O_1((\hbar/i)\partial_q, q)\psi = -\hbar^2 \partial_q^2 \psi, \quad O_2((\hbar/i)\partial_q, q)\psi = -\hbar^2 \left[\partial_q^2 \psi - \frac{2}{q^2} \psi \right].$$

(Exercice : montrez cela en détail.)

Il n'y a pas de règle absolue pour traiter cette ambiguïté. En général, on écrit le Hamiltonien en coordonnées cartésiennes de la façon la plus simple. A la fin ce n'est que l'expérience qui peut déterminer la forme correcte.

Comme exemple nous considérons un atome avec un noyau de charge Ze , de position et d'impulsion \mathbf{X} et \mathbf{P} ainsi que de masse M entouré par Z électrons de charge $-e$ et de masse m avec leur position et impulsion $(\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_j)$. La fonction de Hamilton est donc

$$\begin{aligned} H(\mathbf{X}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_z, \mathbf{P}, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_z) &= \\ \frac{1}{2M} \mathbf{P}^2 + \sum_{j=1}^Z \frac{1}{2m} \mathbf{p}_j^2 - \sum_{j=1}^Z \frac{Ze^2}{|\mathbf{X} - \mathbf{x}_j|} + \sum_{j < k} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j|}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

L'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde $\psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_Z)$, $\psi \in L^2(\mathbb{R}^{3(Z+1)})$ devient alors

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{X}} - \sum_{j=1}^Z \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{x}_j} - \sum_{j=1}^Z \frac{Ze^2}{|\mathbf{X} - \mathbf{x}_j|} + \sum_{j < k} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j|} \right] \psi. \quad (2.13)$$

Si l'on néglige le mouvement du noyau car $M \simeq 2A \times 10^3 m$ (avec A est le nombre de nucléons, c'est-à-dire protons et neutrons dans le noyau) ainsi que l'interaction entre les électrons, on obtient Z atomes d'hydrogène découplés. Si on accepte encore le 'principe de Pauli', qui dit que deux électrons ne peuvent jamais être dans le même état, ainsi que le 'spin' de l'électron qui peut prendre deux valeurs (nous discuterons ceci dans le chapitre 4), on a pour (n, ℓ) fixé $2(2\ell + 1)$ états différents. On obtient de cette façon le modèle des couches atomiques dans sa forme de base. L'état fondamental des atomes est obtenu en remplissant à fur et mesure les états de l'atome d'hydrogène, voir table 2.1 pour $n = 1$ et $n = 2$.

Les éléments suivants qui remplissent aussi la couche $n = 3$ ne remplissent que les états de moment angulaire $\ell = 0$, dits niveaux "s" et $\ell = 1$ dits niveaux "p" jusqu'au prochain gaz noble, l'argon. Pour les niveaux avec $\ell = 2$, dits niveaux "d", l'interaction entre les électrons ne peut plus être négligée et l'énergie du niveau $(n = 4, \ell = 0)$, $(4, s)$ est en effet plus faible que celle de $n = 3, \ell = 2$, $(3, d)$.

2.3 Valeurs d'attente, bras et kets

Soit $\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ un état physique (nous n'indiquons pas explicitement la dépendance temporelle). La valeur d'attente d'une fonction $F : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}$ est donnée par

$$\langle \psi, F\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^{3N}} F(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) |\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)|^2 d^{3N}x. \quad (2.14)$$

Cette valeur d'attente peut être généralisée sur n'importe quel opérateur linéaire, A qui agit sur notre espace de Hilbert, dans ce cas $L^2(\mathbb{R}^{3N})$,

$$\langle \psi, A\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^{3N}} \bar{\psi}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) (A\psi)(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) d^{3N}x. \quad (2.15)$$

Z	nom	n	$\ell = 0$ (s)	$\ell = 1$ (p)	total nr. d'électrons
1	H	1	1	–	1
2	He	1	2	–	2
3	Li	1	2	–	
		2	1	0	3
4	Be	1	2	–	
		2	2	0	4
5	B	1	2	–	
		2	2	1	5
6	C	1	2	–	
		2	2	2	6
7	N	1	2	–	
		2	2	3	7
8	O	1	2	–	
		2	2	4	8
9	F	1	2	–	
		2	2	5	9
10	Ne	1	2	–	
		2	2	6	10
⋮					

TABLE 2.1 – Le modèle des couches atomiques pour $n = 1$ et 2.

Pour que cette valeur d'attente soit réelle, il faut que A soit un opérateur symétrique,

$$\langle \psi, A\psi \rangle = \overline{\langle \psi, A\psi \rangle} = \int_{\mathbb{R}^{3N}} \overline{(A\psi)(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)} \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) d^{3N}x = \langle A\psi, \psi \rangle. \quad (2.16)$$

En général, nous avons

$$\langle \psi, A\psi \rangle = \langle A^* \psi, \psi \rangle,$$

où l'opérateur A^* est l'hérmitien conjugué de A .

Pour le cas où la dimension de l'espace est $n < \infty$ (finie), A est une matrice $n \times n$, et $A^* = \bar{A}^T$.

Nous introduisons encore une autre notation. Pour un état physique nous écrivons $|\psi\rangle$. Ceci est appelé un 'ket'. Pour l'adjoint, ψ^* nous écrivons $\langle \psi|$ ce qui est appelé un 'bra' et pour le produit scalaire nous écrivons

$$\langle \psi|\phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^{3N}} \bar{\psi}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \phi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) d^{3N}x, \quad (2.17)$$

ce qui est un 'braket' (crochet). Par exemple un état propre lié ($E < 0$) de l'atome d'hydrogène est donné par le ket $|\psi_{n\ell m}\rangle \equiv |n, \ell, m\rangle$ et un état propre de l'oscillateur harmonique est donné par le ket $|u_n\rangle \equiv |n\rangle$. Dans le cas d'un nombre fini de degrés de liberté, le 'ket' est une colonne tandis que le 'bra' est une ligne (voir exercices).

Pour la valeur d'attente d'un opérateur nous écrivons alors

$$\langle \psi, A\psi \rangle \equiv \langle \psi|A|\psi \rangle. \quad (2.18)$$

Soit $e_i \equiv |i\rangle$ une base orthonormée de notre espace de Hilbert, c'est-à-dire $\langle i|j \rangle = \delta_{ij}$. Les éléments matriciels de l'opérateur A sont les 'brackets'

$$A_{ij} = \langle i|A|j \rangle \in \mathbb{C}. \quad (2.19)$$

Si un état $|\psi\rangle$ est développé dans la base $|i\rangle$ via

$$|\psi\rangle = \sum_j \psi_j |j\rangle, \quad \psi_j = \langle j|\psi \rangle \in \mathbb{C}, \quad (2.20)$$

$$\|\psi\|^2 = \langle \psi|\psi \rangle = \sum_{ij} \bar{\psi}_i \psi_j \langle i|j \rangle = \sum_j |\psi_j|^2. \quad (2.21)$$

On peut écrire

$$\langle \psi|A|\psi \rangle = \sum_{ij} \bar{\psi}_i \psi_j A_{ij}, \quad \text{et} \quad (2.22)$$

$$\langle \phi|\psi \rangle = \sum_i \bar{\phi}_i \psi_i. \quad (2.23)$$

Dans un espace de Hilbert de dimension finie, ceci sont les produits matriciels et scalaires usuels. Pour un espace de Hilbert de dimension infinie, comme $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ il y a des subtilités concernant l'existence de ces sommes infinies que nous ne discutons pas ici.

D'après (2.14), la probabilité que nos particules se trouvent à l'intérieur d'un ensemble $\Delta \subset \mathbb{R}^{3N}$ si le système est dans l'état ψ est donnée par

$$W_\psi(\Delta) = \int_{\mathbb{R}^{3N}} \chi_\Delta(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) |\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)|^2 d^{3N}x = \int_\Delta |\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)|^2 d^{3N}x. \quad (2.24)$$

Ici $\chi_\Delta : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}$ est la fonction caractéristique de l'ensemble Δ ,

$$\chi_\Delta(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \begin{cases} 1 & \text{si } (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \in \Delta \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.25)$$

W_ψ définit une densité de probabilité sur \mathbb{R}^{3N} qui ne dépend pas de la phase de ψ .

Comme exemple important pour la valeur d'attente d'une observable, nous considérons l'opérateur d'impulsion de la particule $j : \mathbf{p}_j = \frac{\hbar}{i} \nabla_j$. La valeur d'attente est alors

$$\langle \psi | \mathbf{p}_j | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^{3N}} \bar{\psi}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_j \psi \right) (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) d^{3N}x. \quad (2.26)$$

Ici nous remplaçons ψ par sa transformée de Fourier. Au lieu de \mathbf{k} nous utilisons comme variable l'impulsion, $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$,

$$\hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) = \frac{1}{(2\pi)^{3N/2}} \int \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sum_k \mathbf{p}_k \cdot \mathbf{x}_k\right) d^{3N}x \quad (2.27)$$

$$\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \frac{1}{(2\pi)^{3N/2}} \int \hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_k \mathbf{p}_k \cdot \mathbf{x}_k\right) \frac{d^{3N}p}{\hbar^{3N}}. \quad (2.28)$$

Comme la transformation de Fourier est unitaire, nous avons

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \hat{\phi} | \hat{\psi} \rangle. \quad (2.29)$$

De plus,

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_j | \psi \rangle &= \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_j \psi \right) (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3N/2}} \int \hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) \frac{\hbar}{i} \nabla_j \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_k \mathbf{p}_k \cdot \mathbf{x}_k\right) \frac{d^{3N}p}{\hbar^{3N}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3N/2}} \int \mathbf{p}_j \hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_k \mathbf{p}_k \cdot \mathbf{x}_k\right) \frac{d^{3N}p}{\hbar^{3N}} \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \mathbf{p}_j | \psi \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{3N}} \int \overline{\hat{\psi}(\mathbf{p}'_1, \dots, \mathbf{p}'_N)} \mathbf{p}_j \hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_k (\mathbf{p}_k - \mathbf{p}'_k \cdot \mathbf{x}_k)\right) \frac{d^{3N}p}{\hbar^{3N}} \frac{d^{3N}p'}{\hbar^{3N}} d^{3N}x \\
&= \int \overline{\hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)} \mathbf{p}_j \hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) \frac{d^{3N}p}{\hbar^{3N}} \quad (2.31) \\
&= \int \mathbf{p}_j |\hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)|^2 \frac{d^{3N}p}{\hbar^{3N}}. \quad (2.32)
\end{aligned}$$

Ici nous avons utilisé que $\int \exp(i(p - p')x/\hbar) dx = 2\pi\hbar\delta(p - p')$.

Ceci implique

$$\boxed{\widehat{\mathbf{p}_j |\psi\rangle} = |\mathbf{p}_j \hat{\psi}\rangle}, \quad (2.33)$$

et nous pouvons alors interpréter $|\hat{\psi}|^2$ comme densité de probabilité dans l'espace des impulsions. Pour un ensemble $\Delta \subset \mathbb{R}^{3N}$

$$W_{\hat{\psi}}(\Delta) = \int_{\Delta} |\hat{\psi}(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)|^2 \frac{d^{3N}p}{\hbar^{3N}} \quad (2.34)$$

est la probabilité que les impulsions de nos particules soient dans l'ensemble Δ .

Pour des opérateurs qui sont donnés purement par des dérivées, il est plus astucieux de calculer les valeurs d'attente dans l'espace des impulsions où ils sont des simples multiplications, tandis que pour des opérateurs donnés par des fonctions des positions on préfère travailler dans l'espace des positions. En générale un opérateur peut bien sur être un mélange des deux (par exemple le Hamiltonien).

Exercice : Montrer que dans l'espace des impulsions l'opérateur \mathbf{x}_j est donné par $\mathbf{x}_j |\hat{\psi}\rangle = i\hbar |\nabla_{\mathbf{p}_j} \hat{\psi}\rangle$.

Pour deux opérateurs A, B sur un espace de Hilbert nous introduisons encore le commutateur. C'est l'opérateur défini par

$$\boxed{[A, B] = AB - BA}. \quad (2.35)$$

Par la suite nous énumérons les coordonnées des positions et impulsions de 1 à $f = 3N$, et nous les appelons comme en mécanique classique, $(q_1, \dots, q_f; p_1, \dots, p_f)$. Pour une fonction $F(q_1, \dots, q_f)$ compris comme opérateur sur notre espace de Hilbert¹, $L^2(\mathbb{R}^f)$ nous pouvons calculer le commutateur $[p_j, F]$

$$[p_j, F]\psi = \frac{\hbar}{i} (\partial_j(F\psi) - F\partial_j\psi) = \frac{\hbar}{i} (\partial_j F)\psi. \quad (2.36)$$

1. Pour $\Psi \in L^2(\mathbb{R}^f)$, $(F\Psi)(q_1, \dots, q_f) = F(q_1, \dots, q_f)\Psi(q_1, \dots, q_f)$.

De même pour une fonction des impulsions, $G(p_1, \dots, p_f)$ nous calculons le commutateur avec q_j dans l'espace des impulsions :

$$[q_j, G]\hat{\psi} = i\hbar \left(\partial_{p_j}(G\hat{\psi}) - G\partial_{p_j}\hat{\psi} \right) = i\hbar(\partial_{p_j}G)\hat{\psi}. \quad (2.37)$$

Ici nous avons utilisé le résultat de l'exercice. Evidemment F commute avec toute fonction des q_j et G commute avec toute fonction des p_j . En résumé nous notons

$$[q_j, F(q_1, \dots, q_f)] = 0 \quad (2.38)$$

$$[p_j, F(q_1, \dots, q_f)] = \frac{\hbar}{i} \partial_j F(q_1, \dots, q_f) \quad (2.39)$$

$$[q_j, G(p_1, \dots, p_f)] = i\hbar \partial_{p_j} G(p_1, \dots, p_f) \quad (2.40)$$

$$[p_j, G(p_1, \dots, p_f)] = 0 \quad (2.41)$$

$$\quad (2.42)$$

$$\quad (2.43)$$

2.3.1 Le théorème de Ehrenfest

Dans ce paragraphe nous démontrons le théorème de Ehrenfest. Ce théorème donne la loi d'évolution dans le temps des valeurs d'attente des coordonnées q_j et des impulsions conjuguées p_j d'un système quantique.

Il stipule que les équations d'évolution des valeurs d'attentes des positions et des impulsions sont formellement identiques aux équations de Hamilton de la mécanique classique si on remplace chaque grandeur qui figure dans les équations classiques par sa valeur d'attente.

Ce théorème découle directement de la définition de valeur d'attente combinée avec l'équation de Schrödinger.

Il faut encore noter que l'opérateur de Hamilton, H , est symétrique, ce qui est facile à vérifier directement pour les exemples que nous avons discutés dans ce cours. Dans le prochain chapitre, nous allons voir que toute observable réelle doit être représentée par un opérateur auto-adjoint, et donc aussi le Hamiltonien qui représente l'énergie du système.

Pour un opérateur quelconque, il suit alors que

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\psi|A|\psi\rangle &= \langle\partial_t\psi|A|\psi\rangle + \langle\psi|A|\partial_t\psi\rangle + \langle\psi|\partial_tA|\psi\rangle \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\langle H\psi|A|\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|A|H\psi\rangle + \langle\psi|\partial_tA|\psi\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|[A, H]|\psi\rangle + \langle\psi|\partial_tA|\psi\rangle
\end{aligned} \tag{2.44}$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|[A, H]|\psi\rangle + i\hbar\langle\psi|\partial_tA|\psi\rangle. \tag{2.45}$$

En particulier, un opérateur qui n'a pas de dépendance explicite du temps, est conservé sous l'évolution du système si et seulement si il commute avec le Hamiltonien, H . Remarque : dans cette équation le commutateur remplace le crochet de Poisson de la mécanique classique.

Pour simplifier la notation, nous supprimons l'état ψ fixé dans les expressions pour les valeurs d'attente dans le reste de ce paragraphe, $\langle A \rangle \equiv \langle\psi|A|\psi\rangle$. Pour les positions et les impulsions la relation (2.45) implique donc

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle q_j \rangle = \langle [q_j, H] \rangle \tag{2.47}$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle p_j \rangle = \langle [p_j, H] \rangle. \tag{2.48}$$

$$\tag{2.49}$$

Les équations (2.39) à (2.42) impliquent alors

$$\frac{d}{dt}\langle q_j \rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p_j} \right\rangle \tag{2.50}$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_j \rangle = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\rangle, \tag{2.51}$$

c'est-à-dire les équations canoniques pour les valeurs d'attente. Les relations. (2.50) et (2.51) sont les équations de Ehrenfest.

Attention! Il n'est en général pas exact d'affirmer que les valeurs d'attente $\langle q_j \rangle$ et $\langle p_j \rangle$ suivent des orbites classiques. Pour ceci il faudrait que $\left\langle \frac{\partial H}{\partial p_j} \right\rangle$ pût être remplacé par $\frac{\partial H}{\partial \langle p_j \rangle}(\langle q_1 \rangle, \dots, \langle q_f \rangle, \langle p_1 \rangle, \dots, \langle p_f \rangle)$ ce qui n'est en général pas le cas sauf si le Hamiltonien est un polynôme d'ordre 2 dans ses arguments (e.g. particule libre ou oscillateur harmonique).

Nous considérons, à titre d'exemple, une particule dans un potentiel,

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{x}). \quad (2.52)$$

Nous introduisons la force

$$\mathbf{F} = -\nabla V. \quad (2.53)$$

Les équations de Ehrenfest, (2.50) et (2.51) sont dans ce cas

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{x} \rangle = \frac{1}{m} \langle \mathbf{p} \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{F} \rangle. \quad (2.54)$$

Ce qui implique encore

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{F} \rangle. \quad (2.55)$$

L'analogie quantique de la loi de Newton. Pour que la position

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \int \bar{\psi}(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} \psi(\mathbf{x}, t) d^3x$$

suive effectivement l'équation classique de Newton, il faut que l'on puisse remplacer dans (2.55) la valeur d'attente de la force,

$$\langle \mathbf{F} \rangle = \int \bar{\psi}(\mathbf{x}, t) \mathbf{F}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) d^3x \quad (2.56)$$

par $\mathbf{F}(\langle \mathbf{x} \rangle)$. Exercice : montrez ceci !

Lorsque la force est nulle (particule libre) ou linéaire en \mathbf{x} (oscillateur harmonique) ou encore constante (champ électrique constant), ceci est rigoureusement le cas. Sinon, cette substitution n'est justifiée que si la fonction d'onde reste localisée dans une région suffisamment réduite pour que la force garde une valeur pratiquement constante dans toute cette région.

2.4 Les relations de commutation canoniques et la relation d'incertitude

Pour les opérateurs de position et d'impulsion les équations (2.39) à (2.42) impliquent les relations de commutation suivantes

$$[q_j, q_k] = 0 \quad (2.57)$$

$$[p_j, p_k] = 0 \quad (2.58)$$

$$[p_j, q_k] = -\frac{\hbar}{i} \delta_{jk} \mathbb{I}. \quad (2.59)$$

Ici l'opérateur \mathbb{I} dénomme l'identité définie par : $\mathbb{I}\psi = \psi$.

Les équations (2.57) et (2.58) sont évidentes dans la l'espace des positions respectivement des impulsions où les opérateurs correspondent à des simples multiplications. Si un opérateur est nul dans l'espace des impulsions il l'est aussi dans l'espace des positions car si A est notre opérateur dans l'espace des positions et \hat{A} est le même opérateur dans l'espace des impulsions nous avons

$$\hat{A} = U^*AU, \quad (2.60)$$

où U est la transformation de Fourier, un opérateur unitaire.

Ces relations de commutation sont en analogie stricte avec les crochets de Poisson de la mécanique classique. En effet, le crochet de Poisson en est la limite classique comme on vérifie facilement avec l'ansatz (2.83) pour la fonction d'onde que nous utiliserons dans le prochain paragraphe pour discuter la limite classique.

Pour un état ψ donné nous introduisons les opérateurs

$$\Delta q_j = q_j - \langle \psi | q_j | \psi \rangle \mathbb{I} \quad \text{et} \quad \Delta p_j = p_j - \langle \psi | p_j | \psi \rangle \mathbb{I}. \quad (2.61)$$

Comme le deuxième terme est juste un nombre qui commute avec tous les opérateurs,

$$[\Delta p_j, \Delta q_k] = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk} \mathbb{I}. \quad (2.62)$$

Pour $\alpha \in \mathbb{R}$ nous avons alors

$$0 \leq \|(\alpha \Delta q_j + i \Delta p_k) \psi\|^2 = \langle (\alpha \Delta q_j + i \Delta p_k) \psi | (\alpha \Delta q_j + i \Delta p_k) \psi \rangle. \quad (2.63)$$

Comme Δq_j et Δp_k sont des opérateurs symétriques (hermitiens, auto-adjoints)

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle \psi | (\alpha \Delta q_j - i \Delta p_k) (\alpha \Delta q_j + i \Delta p_k) \psi \rangle \\ &= \alpha^2 \langle \psi | (\Delta q_j)^2 | \psi \rangle - \alpha \hbar \delta_{jk} + \langle \psi | (\Delta p_k)^2 | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Ceci implique que cette équation quadratique en α a au plus une racine réelle. Pour $j \neq k$ ceci est évident. Pour $j = k$ nous demandons alors que le discriminant ne soit pas positif, c'est-à-dire

$$\frac{\hbar^2}{4} \leq \langle \psi | (\Delta q_j)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta p_j)^2 | \psi \rangle. \quad (2.65)$$

En définissant l'écart-type par

$$\overline{\Delta q_j} := \sqrt{\langle \psi | (\Delta q_j)^2 | \psi \rangle}, \quad \overline{\Delta p_k} := \sqrt{\langle \psi | (\Delta p_k)^2 | \psi \rangle}, \quad (2.66)$$

l'équation (2.65) devient

$$\boxed{\overline{\Delta q_j} \overline{\Delta p_k} \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{jk}, \quad \text{Heisenberg (1927).}} \quad (2.67)$$

Ceci est la 'relation d'incertitude de Heisenberg'. Elle a perturbé beaucoup les physiciens qui ont développé la mécanique quantique. Tout d'abord Einstein, mais aussi Bohr et Heisenberg lui-même. Les relations d'incertitude nous disent : les variances des positions et des impulsions ne sont pas indépendantes pour $j = k$. Plus $\overline{\Delta q_j}$ est petit, plus $\overline{\Delta p_j}$ sera grand. En mécanique quantique il n'existe pas d'état pour lequel les variances de ces variables deviennent simultanément arbitrairement petites.

Notez encore l'importance de \hbar . Dans la limite $\hbar \rightarrow 0$, cette incertitude disparaît et nous arrivons à la situation de la physique classique.

On peut aussi démontrer que la relation (2.67) est optimale. Pour ceci nous considérons un seul degré de liberté et nous prenons pour ψ un paquet d'onde gaussien,

$$\psi = \left(\frac{\pi\hbar}{\alpha}\right)^{-1/4} \exp\left(-\frac{p_0^2}{\hbar\alpha}\right) \exp\left(-\frac{\alpha}{2\hbar} \left[q - q_0 - \frac{i}{\alpha}p_0\right]^2\right), \quad (2.68)$$

ou q_0 et p_0 sont des constantes réelles. Avec les résultats sur l'intégration gaussienne de la série 1, il est facile de vérifier (exercice!) que

$$\langle \psi | q | \psi \rangle = q_0 \quad \text{et} \quad \langle \psi | p | \psi \rangle = p_0, \quad (2.69)$$

ainsi que

$$\overline{\Delta q} = \left(\frac{\hbar}{2\alpha}\right)^{1/2} \quad \text{et} \quad \overline{\Delta p} = \left(\frac{\hbar\alpha}{2}\right)^{1/2}, \quad \text{donc} \quad \overline{\Delta q} \cdot \overline{\Delta p} = \frac{\hbar}{2}, \quad (2.70)$$

ce qui est la valeur minimale de ce produit d'écart-type.

2.5 Relation d'incertitude et complémentarité

"Je me souviens de nombreuses discussions avec Bohr, qui duraient tard dans la nuit et se terminaient presque en désespoir de cause. Quand, à la fin de ces discussions, j'allais me promener seul dans le parc voisin, je me répétais sans cesse la question de savoir si la nature pouvait vraiment être aussi absurde qu'elle nous apparaissait dans les expériences atomiques.

(Heisenberg [6], traduction libre de l'allemand)

Dans ce paragraphe nous voulons illustrer la relation d'incertitude avec des expériences. Ici il est important de réaliser qu'il ne s'agit pas d'une incertitude due à des erreurs de mesure, mais d'une incertitude inhérent à la théorie : nous ne pouvons pas connaître avec précision arbitraire la position et l'impulsion d'une particule, même si nous connaissons exactement l'état ψ du système.

En général, si nous considérons deux observables arbitraires qui sont représentées par des opérateurs A et B , et qui ne commutent pas, comme q et p , dans un état donné, le produit des écarts-type $\overline{\Delta A} \cdot \overline{\Delta B}$ a un minimum, qui est donné par le commutateur entre A et B et qui est proportionnel à \hbar car il doit tendre vers 0 dans la limite classique.

2.5.1 Changement de l'état lors d'une mesure de position

Nous considérons une expérience construite de telle façon qu'elle puisse mesurer si une particule donnée est à l'intérieur d'une région Δ de l'espace. Avant la mesure, notre état est ψ et donc la probabilité de trouver la particule dans Δ est

$$W_\psi(\Delta) = \int_\Delta |\psi(\mathbf{x})|^2 d^3x. \quad (2.71)$$

Une fois la mesure faite, supposons que notre appareil indique que la particule est dans Δ . Elle se trouve alors dans un nouvel état ψ' avec

$$(i) \quad W_{\psi'}(\Delta) = 1.$$

Nous supposons, de plus, que pour des sous-ensembles, $\Delta_1 \subset \Delta$ les rapports des probabilités ne changent pas. C'est-à-dire,

$$(ii) \quad \frac{W_{\psi'}(\Delta_1)}{W_{\psi'}(\Delta)} = \frac{W_\psi(\Delta_1)}{W_\psi(\Delta)}. \quad (2.72)$$

L'état

$$\boxed{\psi'(\mathbf{x}) = \frac{\chi_{\Delta}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})}{\|\chi_{\Delta}\psi\|}} \quad (2.73)$$

satisfait clairement les conditions (i) et (ii). Nous allons voir dans le chapitre 3 que ces conditions déterminent ψ' uniquement.

La transition $\psi \rightarrow \psi'$ lors d'une mesure de position (idéale) s'appelle la réduction du paquet d'onde. Ce saut instantané lors d'une mesure a mené à de nombreuses discussions. C'est véritablement la pierre d'achoppement dans le débat de l'interprétation de la mécanique quantique. Nous suivons ici l'interprétation de Copenhague. Il y en a d'autres mais pas moins bizarres : Interprétation 'many worlds' de H. Everett, interprétation de Broglie-Bohm, interprétation des histoires consistantes, etc.. Même si elle n'est pas très satisfaisante, l'interprétation de Copenhague est peut-être la plus 'économique', et elle est en accord avec les phénomènes expérimentaux

Comme exemple simple nous considérons une particule dans l'intervalle $[0, L]$. Au début nous n'avons aucune information sur la position de la particule, sauf qu'elle se trouve dans cette interval, et sone fonction d'onde est alors

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}} & \text{si } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{si } x < 0 \text{ ou } x > L. \end{cases}$$

Maintenant nous effectuons une mesure qui nous montre que la particule n'est pas dans $[0, L/2]$. Après cela l'état de la particule est

$$\psi'(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} & \text{si } L/2 < x \leq L \\ 0 & \text{si } x \leq L/2 \text{ ou } x > L. \end{cases}$$

Dans ce qui suit, nous discutons comment le principe d'incertitude de Heisenberg se manifeste dans certaines expériences. Le point crucial est que, dû à la taille fini du quantum de Planck, \hbar , il n'est pas possible de prendre en considération de façon déterministe les effets de l'appareil de mesure sur l'objet considéré. Ceci est très nouveau par rapport à la physique classique où l'on peut toujours soit réduire l'effet de l'appareil de mesure en dessous la précision souhaitée soit le prendre en compte dans l'analyse. Par exemple si nous déterminons la position d'un objet macroscopique par son image sur un plaque photographique, nous pouvons réduire la pression du rayonnement électromagnétique de façon arbitraire. Pour des objets microscopiques il faut prendre en compte la nature quantique du rayonnement. La transmission d'impulsion d'un photon sur une particule n'est pas déterminée parfaitement. Plus nous voulons déterminer sa position précisément, moins précise sera la mesure de l'impulsion.

2.5.2 Mesures de position

Nous discutons deux méthodes.

a) Avec un diaphragme

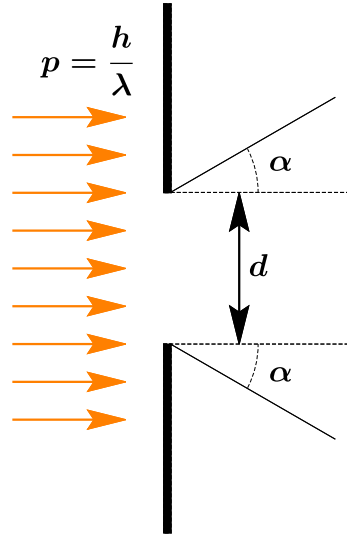


FIGURE 2.1 – Le schéma de la mesure de la position avec un diaphragme. (Figure de J. Francfort.)

Nous considérons un faisceau (presque) mono énergétique d'électrons avec une impulsion 'purement' horizontale. Pour déterminer leur position normale à leur impulsion nous insérons un diaphragme normal à la direction du faisceau, avec une ouverture de taille d . Après avoir passé par le diaphragme, la position de l'électron en direction x (voir schéma 2.1) est localisée avec la précision $\Delta x = d$. Par contre, dû à la diffraction au bord du diaphragme (effet ondulatoire) le faisceau s'étend d'un angle

$$\sin \alpha \simeq \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{p\Delta x} . \quad (2.74)$$

Ceci mène à une imprécision de l'impulsion en direction x donnée par

$$\Delta p_x = p \sin \alpha \simeq \frac{h}{\Delta x} \quad (\lambda = 2\pi/k = 1/(hp)) , \quad (2.75)$$

et on trouve bien $\Delta x \Delta p_x \sim h$.

On pourrait essayer de mesurer la transmission d'impulsion de l'écran sur l'électron en laissant l'écran libre de bouger. Par contre, pour que la position de l'électron soit quand même bien mesurée, il faut que l'écran bouge

d'une distance $\delta x \ll \Delta x$; mais aussi l'écran est un objet quantique et donc son impulsion n'est déterminée que avec la précision $\delta p \gtrsim h/\delta x \gg \Delta p_x$, et donc on n'apprend rien de plus. Pour ceci, il est impératif que la relation d'incertitude soit aussi valable pour l'appareil de mesure, sinon on pourrait la contourner aussi pour les électrons.

b) Avec un microscope

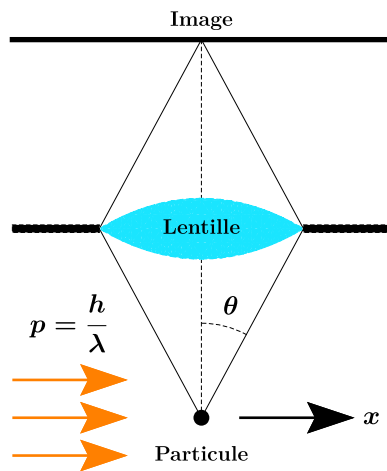


FIGURE 2.2 – Le schéma de la mesure de la position avec un microscope. (Figure de J. Francfort.)

Nous déterminons la position d'un objet en l'illuminant et en regardant son image à travers un microscope. Pour une résolution spatiale élevée il faut utiliser des longueurs d'onde courtes car chaque point de l'objet émet de la lumière vers la lentille dans un cône d'ouverture ϑ (voir schéma 2.2). Ceci génère comme image une 'tache de diffraction' de taille

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\sin \vartheta} \quad (2.76)$$

Ici λ est la longueur d'onde de la lumière et ϑ est le demi-angle d'ouverture du faisceau de lumière diffusé à l'électron et focalisé dans la lentille.

Nous supposons que l'électron est fixé sur le plan d'objet du microscope. La diffusion avec la lumière transmet de l'impulsion de grandeur arbitraire, car nous ne pouvons pas savoir quel chemin le photon a pris dans le microscope. Son changement d'impulsion en direction x est donc à l'intérieur de l'angle

ϑ , ce qui donne

$$\Delta p_x \sim \frac{h}{\lambda} \sin \vartheta \quad (2.77)$$

et donc à nouveau $\Delta x \Delta p_x \sim h$.

2.5.3 Mesure de l'impulsion

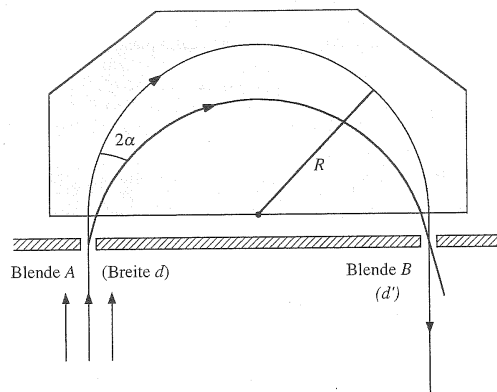


FIGURE 2.3 – Le schéma de la mesure de l'impulsion avec un aimant homogène. (Figure copié de N. Straumann, Quantenmechanik)

L'impulsion d'une particule chargée est souvent mesurée par sa déviation dans un champ magnétique homogène. En électrodynamique I vous avez déterminé la fréquence de Larmor donnée par $\omega_L = (e/mc)B$. Pour un électron qui tourne dans un cercle de rayon R , l'impulsion est alors

$$p = mv = mR\omega_L = \frac{e}{c}BR. \quad (2.78)$$

Nous montrons alors plus l'incertitude sur R (et donc sur p) est petite, plus l'incertitude sur la position sera grande : l'expérience est esquissée dans la fig. 2.3. Pour simplifier nous supposons que dans l'entrée par l'ouverture A, l'impulsion transversale et la position longitudinale sont connues avec une grande précision. La largeur des ouvertures sont respectivement $2d$ et $2d'$. L'incertitude longitudinale de l'impulsion mesurée, due à la variation finie de la position transversale des particules est donc

$$\Delta p = \frac{e}{c}B(d + d') = \frac{p}{R}(d + d'). \quad (2.79)$$

La diffraction du faisceau d'électrons génère une imprécision de la position longitudinale : la direction de l'impulsion a une incertitude $\alpha \simeq \lambda/d = h/(pd)$. Sans ceci, le temps que l'électron prend pour parcourir le demi-cercle de A à B serait $t = \pi/\omega_L$, indépendamment de p et du rayon R . Cependant, comme l'impulsion de l'électron à A n'est pas exactement longitudinale, il décrit un demi-cercle à un angle 2α près, donc le temps où l'électron arrive à B a une incertitude $\Delta t = 2\alpha/\omega_L$. L'incertitude de la position qui y correspond est $\Delta x = v\Delta t = 2\alpha pc/(eB) \simeq 2hc/(edB)$. Pour le produit nous obtenons

$$\Delta p \Delta x \simeq 2h(1 + d'/d) > h. \quad (2.80)$$

Ces exemples et d'autres montrent que la relation d'incertitude ne peut pas être contournée. Même Einstein, qui a essayé pendant des années de la contourner, l'a finalement acceptée.

2.5.4 Expérience de la double fente

Nous revenons ici à l'expérience de la double fente que nous avons discutée tout au début. Elle montre de façon impressionnante l'impossibilité de décrire le comportement des électrons et photons de manière classique. L'expérience est représentée dans la fig. 1.3, un schéma est montré dans fig. 2.4. Si la

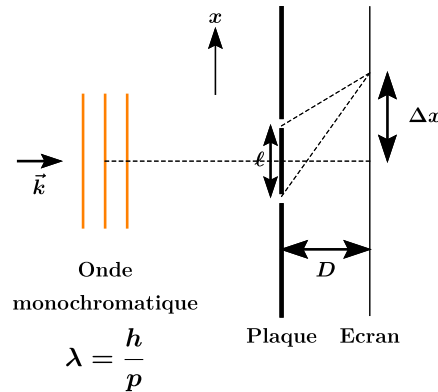


FIGURE 2.4 – Le schéma de l'expérience double-fente.
(Figure de J. Francfort)

position de la plaque avec les fentes est bien fixée, les images des particules suivent le schéma d'interférence discuté dans le paragraphe 1.2. Ceci est obtenu avec la représentation des particules comme une onde. Il faut pour

cela que l'incertitude de la position de la plaque, δx , soit plus petite que la distance entre les maxima d'interférence donné par $\Delta x \sim \lambda D/\ell$. C'est-à-dire

$$\delta x < \lambda D/\ell. \quad (2.81)$$

Lors de la conférence de Solvey en 1930, Einstein a proposé de déterminer si la particule est passée par la fente supérieure ou inférieure en mesurant la transmission d'impulsion sur la plaque. La différence d'impulsion pour les deux chemins est

$$\Delta p \simeq p\ell/D \sim h/\Delta x. \quad (2.82)$$

Il fallait donc mesurer l'impulsion de la plaque avec une précision $\delta p < \Delta p$. Par contre avec (2.81) ceci viole la relation d'incertitude pour la plaque.

Il y avait plusieurs autres propositions pour décider (aussi avec retardement) par quelle fente un électron est passé. Par contre, ceci détruit à chaque fois le schéma d'interférence et mène à la superposition de deux gaussiennes comme on s'y attend pour des particules classiques.

En résumé, pour une plaque bien fixée sans autre mesure, un faisceau d'électrons produit un schéma d'interférence comme une onde, et ceci malgré le fait que chaque particule produite sa propre petite tache sur l'écran (voir les photos b et c dans la figure 1.3). Il semble alors que les électrons successifs ne sont pas indépendantes mais 'savent' où les électrons avant eux ont impacté l'écran. Dès le moment où l'on modifie l'expérience de sorte qu'on peut décider par quelle fente un électron est passé, cette 'correlation' se perd et le schéma d'interférence est détruit.

La conclusion est que les 'particules élémentaires' ne sont ni des particules ni des ondes mais encore autre chose qui n'a pas de nom dans le langage quotidien.

2.6 La limite classique

L'interprétation statistique de la fonction d'onde est aussi confirmée par la limite classique qui est intéressante en elle-même. Pour effectuer cette limite nous posons

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x}, t)\right). \quad (2.83)$$

Pour simplifier la notation nous considérons une seule particule, donc $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$. L'équation de Schrödinger est

$$i\hbar\partial_t\psi = H\left(\mathbf{x}, \frac{\hbar}{i}\nabla, t\right)\psi. \quad (2.84)$$

Ici $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ est la fonction de Hamilton classique. Comme exemple nous considérons

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{x}). \quad (2.85)$$

La mécanique classique est obtenue dans la limite $\hbar \rightarrow 0$. Comme \hbar a la dimension d'une action ($[xp]$ ou $[Et]$) ceci est aussi le cas pour S . Nous développons alors

$$S = S^{(0)} + \frac{\hbar}{i} S^{(1)} + \dots. \quad (2.86)$$

Nous insérons ceci dans (2.84) qui doit être satisfait pour toute puissance de \hbar . Nous considérons d'abord le terme de puissance \hbar^0 ce qui donne

$$\frac{\partial S^{(0)}}{\partial t} + H(\mathbf{x}, \nabla S^{(0)}, t) = 0. \quad (2.87)$$

Cependant, c'est exactement l'équation Hamilton-Jacobi pour l'action classique, $S^{(0)} \equiv S_{\text{cl}}$ (voir éq. (6.2) dans mon polycopié de la mécanique classique ou n'importe quel autre texte de la mécanique analytique). Pour notre exemple, nous obtenons à l'ordre \hbar^1

$$\frac{\partial S^{(1)}}{\partial t} + \frac{1}{m} \nabla S^{(0)} \cdot \nabla S^{(1)} + \frac{1}{2m} \Delta S^{(0)} = 0, \quad (2.88)$$

ce qui est une équation linéaire pour $S^{(1)}$.

Pour une solution $S^{(0)}$ de l'équation Hamilton-Jacobi nous considérons les courbes intégrales, $\mathbf{x}(t)$ du champ vectoriel

$$\mathbf{v} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{x}, \nabla S^{(0)}, t). \quad (2.89)$$

Dans notre exemple $\mathbf{v} = \frac{1}{m} \nabla S^{(0)}$. Comme dans la relation (1.55), il suit que $\mathbf{x}(t)$ et $\mathbf{p}(t) = \nabla S^{(0)}(\mathbf{x}(t), t)$ satisfont les équations canoniques,

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}}. \quad (2.90)$$

Si nous posons

$$\rho := \exp(2S^{(1)}) \quad \text{et} \quad \mathbf{J} := \rho \mathbf{v} \quad (2.91)$$

l'équation (2.88) implique l'équation de continuité (2.3). Comme $S^{(0)}$ est l'action classique cette fonction doit être réelle et donc (2.88) requiert que aussi $S^{(1)}$ soit réelle, donc $\rho \geq 0$. Si à un moment donné, la normalisation est telle que

$$\int \rho d^3x = 1, \quad (2.92)$$

ceci reste vrai pour tout temps. Notre approximation décrit donc un ensemble statistique de systèmes avec la densité $\rho = \exp(2S^{(1)})$ dans l'espace des configuration (et non dans l'espace de phase comme dans la mécanique statistique classique!). Les orbites satisfont les équations de la mécanique classique. Comme

$$\psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S^{(0)} + S^{(1)}\right) \quad (2.93)$$

et $S^{(0)}$ ainsi que $S^{(1)}$ sont des fonction réelles, il suit que

$$\rho = \exp(2S^{(1)}) = |\psi|^2. \quad (2.94)$$

Ce qui soutient l'interprétation statistique de la fonction d'onde.

Notez aussi que l'ajout d'une constante dans $S^{(0)}$ dans l'action classique ne change pas le système, par exemple la densité ρ est invariante. La fonction d'onde n'est donc déterminée qu'à une phase constante près.

2.7 L'approximation WKB

La méthode WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin) consiste à introduire un développement de la fonction d'onde en puissance de \hbar et à négliger les termes d'ordre supérieur à \hbar . Nous allons donc un ordre plus loin que dans la limite classique. Cette méthode a une portée plus générale que la limite classique. Nous verrons qu'elle détermine des effets quantiques aussi dans des situations où l'interprétation classique n'a pas de sens, par exemple dans des régions avec $E < V$ d'accès interdit aux particules classiques.

Nous posons d'abord

$$\psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right), \quad (2.95)$$

$$W = S + \frac{\hbar}{i}T, \quad (2.96)$$

et nous demandons que les deux fonctions S et T ne contiennent que des puissances de \hbar^2 . La méthode WKB consiste à développer W en puissances de \hbar et négliger dans l'équation de Schrödinger les termes d'ordre supérieur ou égal à \hbar^2 . Nous remplacerons donc S par $S^{(0)}$ du paragraphe précédent et T par $S^{(1)}$.

La méthode n'a des applications simples que dans les problèmes à une dimension. Nous nous limitons donc au traitement à une dimension et nous nous

proposons de chercher les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger indépendant du temps (1.62). Soit $y(x)$ notre fonction d'onde et $H = -(\hbar^2/2m)\partial_x^2 + V(x)$ le Hamiltonien avec un potentiel V . L'équation de Schrödinger stationnaire devient alors

$$y'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] y = 0. \quad (2.97)$$

Nous posons

$$y = \exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right), \quad W = S + \frac{\hbar}{i}T, \quad (2.98)$$

où S et T ne contiennent que des puissances paires de \hbar . Pour y'' nous obtenons

$$y'' = \left[\frac{i}{\hbar}S'' + T'' + \left(\frac{i}{\hbar}S' + T'\right)^2 \right] y. \quad (2.99)$$

Avec ceci l'équation de Schrödinger devient

$$\frac{i}{\hbar}S'' + T'' - \frac{1}{\hbar^2}(S')^2 + \frac{2i}{\hbar}S'T' + (T')^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V) = 0. \quad (2.100)$$

Les termes impairs en \hbar donnent

$$T' = -\frac{S''}{2S'} = -\frac{1}{2}(\log S')', \quad (2.101)$$

et donc

$$T = -\frac{1}{2}(\log S') + \text{const.} \quad e^T = C(S')^{-1/2}, \quad (2.102)$$

où C est une constante à déterminer pour obtenir une fonction d'onde bien normalisée. Nous insérons cette solution pour T dans (2.100) :

$$(S')^2 = 2m(E - V) + \hbar^2 \left[\frac{3}{4} \left(\frac{S''}{S'}\right)^2 - \frac{1}{2} \frac{S'''}{S'} \right]. \quad (2.103)$$

Cette équation différentielle de 3ème ordre est rigoureusement équivalente à l'équation de Schrödinger stationnaire. L'approximation WKB consiste à développer S en série de puissances de \hbar^2 , c'est-à-dire

$$S = S_0 + \hbar^2 S_1 + \dots \quad (2.104)$$

et à substituer ce développement dans (2.103) et à ne retenir que les termes d'ordre zéro, ce qui donne

$$(S')^2 \simeq (S'_0)^2 = 2m(E - V). \quad (2.105)$$

Cette équation approchée s'intègre sans difficulté. Nous distinguons deux cas, selon le signe de $E - V(x)$.

1er cas : $E - V(x) > 0$. Nous introduisons la longueur d'onde

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V(x))}}. \quad (2.106)$$

Avec ceci l'éq. (2.105) devient $S' = \pm \hbar/\lambda$ et la solution WKB est

$$y(x) = \alpha \sqrt{\lambda} \cos \left(\int^x \frac{dx'}{\lambda(x')} + \varphi \right), \quad (2.107)$$

avec α et φ sont des constantes arbitraires.

2ème cas : $E < V(x)$. Cette région est interdite aux particules classiques. Nous posons

$$L(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V(x) - E)}}. \quad (2.108)$$

L'équation (2.105) est satisfait si $S' = \pm i\hbar/L$. La solution WKB est une combinaison linéaire d'exponentielles réelles :

$$y(x) = \sqrt{L} \left[\gamma \exp \left(\int^x \frac{dx}{L(x)} \right) + \delta \exp \left(- \int^x \frac{dx}{L(x)} \right) \right]. \quad (2.109)$$

Ici nous ne discutons pas le convergence de la série en \hbar^2 mais nous estimons comme critère de validité le terme en S_1 . Le prochain ordre de (2.103) donne

$$2S_0' S_1' = \frac{3}{4} \left(\frac{S_0''}{S_0'} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{S_0'''}{S_0'} = \frac{[(S_0')^{-1/2}]''}{(S_0')^{-1/2}} \quad (2.110)$$

Lorsque $E > V$, $S_0' = \hbar/\lambda$. Après un petit calcul ceci nous donne

$$\hbar S_1' = \pm \frac{\sqrt{\lambda}}{2} (\sqrt{\lambda})'' = \pm \left(\frac{1}{4} \lambda'' - \frac{1}{8} \frac{(\lambda')^2}{\lambda} \right). \quad (2.111)$$

On intègre ceci pour trouver

$$\hbar S_1 = \pm \left(\frac{1}{4} \lambda' - \frac{1}{8} \int^x \frac{(\lambda')^2}{\lambda} dx \right). \quad (2.112)$$

Lorsque $E < V$ on obtient une expression identique avec $L(x)$ au lieu de $\lambda(x)$. Nous demandons que la correction $\hbar^2 S_1$ soit plus petit que l'ordre \hbar , donc $\hbar S_1 \ll 1$. Cette condition est bien réalisée si

$$\lambda'(x) \ll 1 \text{ lorsque } E > V(x) \text{ et } L'(x) \ll 1 \text{ lorsque } E < V(x). \quad (2.113)$$

Ce critère s'exprime par l'inégalité suivante faisant intervenir le potentiel et sa première dérivée,

$$\frac{|m\hbar V'|}{[2m(E - V)]^{3/2}} \ll 1, \quad (2.114)$$

c'est-à-dire le potentiel change peu sur un intervalle $\Delta x \sim \hbar/\sqrt{|mV|}$.

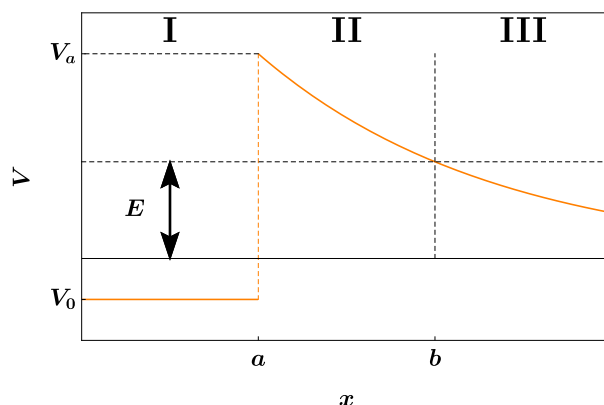


FIGURE 2.5 – Barrière de potentiel $V(x)$. Dans les régions I et III $E > V(x)$ tandis que dans la région II $E < V(x)$. (Figure de J. Francfort)

2.7.1 L'effet tunnel

Evidemment aux point x_r avec $E = V(x_r)$ l'approximation WKB n'est pas valable. Ce sont les points limites du mouvement classique. Souvent l'approximation WKB est utilisée dans les deux régions $E < V$ et $E > V$ et on demande simplement la continuité à x_r .

A titre d'illustration nous appliquons la méthode WKB au calcul du coefficient de transmission pour une particule avec énergie E à travers la barrière de potentiel représentée sur la figure 2.5. Dans la région $x < a$ (région I) $V = V_0 < E$. Lorsque $x > a$, $V(x)$ est une fonction positive décroissante de façon monotone depuis la valeur positive $V_a = V(a) > E$ vers $0 = \lim_{x \rightarrow \infty} V(x)$. Comme $E < V_a$, en mécanique classique, la particule reste confinée dans la région I. Nous verrons que ceci n'est pas le cas en mécanique quantique. Cette transition à travers une barrière d'énergie supérieure à l'énergie de la particule s'appelle '*effet tunnel*'.

Soit $b > a$ le point avec $V(b) = E$. Le point de discontinuité a et le point b divisent l'axe des x en trois régions, I, II et III. Nous supposons que la méthode WKB est applicable dans ces régions. Pour trouver le coefficient de transmission, il faut construire la solution de l'équation de Schrödinger dont la forme asymptotique dans la région III représente une onde purement transmise, donc se propageant dans la direction de x croissante. Cette condition

fixe la solution à une constante près,

$$y_{III}(x) = \sqrt{\lambda} \exp\left(i \int_b^x \frac{dx}{\lambda} - i \frac{\pi}{4}\right). \quad (2.115)$$

La phase $\pi/4$ est ajouté pour faciliter les calculs qui suivent. Cette solution peut être prolongée dans la région II par

$$y_{II}(x) = -i\sqrt{L} \exp\left(\int_x^b \frac{dx}{L}\right) = -i\sqrt{L}e^\tau \exp\left(-\int_a^x \frac{dx}{L}\right), \quad (2.116)$$

expressions dans laquelle on définit

$$\tau = \int_a^b \frac{dx}{L} = \int_a^b \frac{\sqrt{2m(V(x) - E)}}{\hbar} dx. \quad (2.117)$$

Nous posons

$$L_a = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_a - E)}}, \quad k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (2.118)$$

Dans la région I, la solution de l'équation de Schrödinger est de la forme

$$y_I(x) = A \sin(k(x-a)+\delta) = \frac{A}{2i} [\exp(ik(x-a) + i\delta) - \exp(-ik(x-a) - i\delta)]. \quad (2.119)$$

Les constantes A et δ sont déterminées par les conditions de continuité de la fonction d'onde et sa dérivée au point a , soit

$$k \cot \delta = -L_a^{-1}, \quad A \sin \delta = -i\sqrt{L_a}e^\tau. \quad (2.120)$$

La solution y_I est la somme d'une onde incidente et une onde réfléchie. La première exponentielle de (2.119) est l'onde incidente, y_{I+} , en direction $+x$ tandis que la deuxième exponentielle est l'onde réfléchie, y_{I-} qui se propage en direction $-x$. Le flux de l'onde incidente est donné par (2.2) (notez que δ est réelle) et vaut

$$j_{I+} = \frac{\hbar}{2mi} [\bar{y}_{I+} y'_{I+} - (\bar{y}_{I+})' y_{I+}] = \frac{1}{4} |A|^2 \hbar k / m. \quad (2.121)$$

Cependant, le flux de l'onde transmise est simplement $j_{III} = \hbar/m$, donc le coefficient de transmission est

$$T := \frac{j_{III}}{j_{I+}} = \frac{4}{k|A|^2} = \frac{4}{kL_a} \sin^2 \delta e^{-2\tau} = \frac{4}{kL_a} \frac{1}{1 + \cot^2 \delta} e^{-2\tau} \quad (2.122)$$

$$= \frac{4kL_a}{1 + (kL_a)^2} e^{-2\tau} = 4 \frac{\sqrt{(V_a - E)(E - V_0)}}{V_a - V_0} e^{-2\tau}. \quad (2.123)$$

Pour que notre calcul soit valable il faut que $V(x)$ varie suffisamment lentement dans les régions II et III (dans la région I notre solution est exacte). Ceci exige notamment que la barrière ait une épaisseur de plusieurs longueurs d'ondes, donc que $\tau \gg 2\pi$ et par conséquent que T soit extrêmement petit. Nous étudions d'autres exemples dans les exercices.

Chapitre 3

Les principes formels de la mécanique quantique

Dans ce chapitre nous discutons la structure formelle de la mécanique quantique. Pour ceci nous avons besoin de certains théorèmes mathématiques de l'analyse fonctionnelle que nous n'allons pas démontrer ici. Par contre, je donne des références pour les théoricien·ne·s qui veulent retrouver les preuves. Deux références excellentes sont Reed & Simon [10] et Rudin [11]. Nous ne discutons pas non plus les subtilités de domaines de définition mais supposons que tous les opérateurs considérés ici sont définis sur un domaine $\mathcal{D} \subset \mathcal{H}$ qui est dense dans \mathcal{H} .

3.1 Structure cinématique : états, observables valeurs d'attentes

Dans la mécanique des ondes, comme nous l'avons vue jusqu'ici les états à N particules sont décrits par des 'raies unitaires' définies par

$$[\psi] = \{e^{i\alpha}\psi \mid \psi \in L^2(\mathbb{R}^{3N}), \quad \|\psi\| = 1, \quad \alpha \in \mathbb{R}\} \quad (3.1)$$

dans l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^{3N})$. Malgré ceci, dans ce qui suit nous allons souvent appeler un état ψ et nous rappeler que la phase est arbitraire. Ceci seulement là où ça ne joue aucun rôle. Dans la section 3.6, où cette différence est pertinente, nous travaillerons avec des raies unitaires, $[\psi]$.

Les observables (réelles) sont des opérateurs auto-adjoints, $A = A^*$, et la

valeur d'attente dans un état $[\psi]$ est $\langle \psi | A | \psi \rangle \equiv \langle \psi, A\psi \rangle$, $\psi \in [\psi]$. Comme

$$\boxed{\langle \psi, A\psi \rangle = \langle A^*\psi, \psi \rangle = \langle A\psi, \psi \rangle = \overline{\langle \psi, A\psi \rangle}}, \quad (3.2)$$

la valeur d'attente d'une observable est toujours réelle.

Les notions de base sont *état*, *observable*, *distribution de probabilité d'une observable dans un état*.

Soit S un système physique. La mécanique quantique décrit sa structure cinématique comme suit :

- **États** : Les états (pures) sont les raies unitaires d'un espace de Hilbert, \mathcal{H} .
- **Observables** : Les observables sont des opérateurs auto-adjoints (en générale non-bornés) sur \mathcal{H} .
- **Probabilité** : Soit A une observable et $E^A(\cdot)$ la *mesure spectrale* (voir prochain paragraphe) y correspondante. La probabilité que l'on mesure une valeur de A dans l'ensemble (mesurable) $\Delta \subset \mathbb{R}$ si le système est dans l'état ψ est

$$W_\psi^A(\Delta) = \langle \psi, E^A(\Delta)\psi \rangle. \quad (3.3)$$

$W_\psi^A(\cdot)$ est une véritable mesure de probabilité sur \mathbb{R} et

$$\langle \psi, A\psi \rangle = \int \lambda dW_\psi^A \quad (3.4)$$

Pour une fonction $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, mesurable aussi $f(A)$ est une observable et

$$\langle \psi, f(A)\psi \rangle = \int f(\lambda) dW_\psi^A \quad (3.5)$$

3.1.1 Mesure spectrale, le spectre d'un opérateur

Ici nous introduisons la mesure spectrale, $E^A(\cdot)$. Nous commençons par deux exemples :

1) *L'opérateur de multiplication* :

Sur $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ nous considérons l'opérateur de multiplication par x ,

$Q : \psi(x) \mapsto x\psi(x)$. Cet opérateur est non-borné et il existe des fonctions d'ondes sur lesquelles il n'est pas défini, c'est-à-dire des fonctions $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ tel que la fonction $x\psi(x)$ n'est pas dans $L^2(\mathbb{R})$. (Considérez par exemple $\psi(x) = (1/(1+x^2))^{1/2}$.) Pour un ensemble (mesurable) Δ nous posons

$$(E(\Delta)\psi)(x) = \chi_\Delta(x)\psi(x). \quad (3.6)$$

Ici χ_Δ est la fonction caractéristique de l'ensemble Δ , voir éq. (2.25). L'opérateur $E(\cdot)$ a clairement les propriétés suivantes

1. $E(\emptyset) = 0$, $E(\mathbb{R}) = \mathbb{I}$.
2. $E(\Delta)$ est un projecteur. (C'est-à-dire $E(\Delta)$ est auto-adjoint et $E(\Delta)^2 = E(\Delta)$).
3. $E(\Delta_1 \cap \Delta_2) = E(\Delta_1)E(\Delta_2)$.
4. Si $\Delta_1 \cap \Delta_2 = \emptyset$, nous avons $E(\Delta_1 \cup \Delta_2) = E(\Delta_1) + E(\Delta_2)$.
5. Pour tout $\psi \in \mathcal{H}$ avec $\|\psi\| = 1$, la fonction définie sur les ensembles mesurables, $E_\psi = \langle \psi, E(\Delta)\psi \rangle$ définit une mesure de probabilité sur \mathbb{R} .
6. Pour tout $\psi, \phi \in \mathcal{H}$, $E_{\psi, \phi}(\Delta) \equiv \langle \psi, E(\Delta)\phi \rangle$ définit une mesure¹ complexe sur \mathbb{R} .

Une fonction sur les ensembles mesurables avec valeurs dans les opérateurs de projections sur un espace de Hilbert, qui satisfait à ces propriétés, s'appelle une mesure de projections (projector valued measure) ou une *mesure spectrale*.

Comme $|E_{\psi, \phi}(\Delta)| \leq \|\psi\| \|\phi\|$, pour tout fonction (intégrable) bornée, l'intégrale $\int f(\lambda) dE_{\psi, \phi}(\lambda)$ définit une forme bi-linéaire sur \mathcal{H} . D'après le lemme de Riesz [10] il existe alors un opérateur (borné), $\hat{E}(f)$ sur \mathcal{H} tel que

$$\langle \psi, \hat{E}(f)\phi \rangle = \int f dE_{\psi, \phi}. \quad (3.7)$$

Pour cet opérateur nous écrivons

$$\hat{E}(f) = \int f dE. \quad (3.8)$$

Pour notre exemple $dE_{\psi, \phi} = \bar{\psi}(x)\phi(x)dx$ et donc

$$\langle \psi, \hat{E}(f)\phi \rangle = \int f(x)\bar{\psi}(x)\phi(x)dx. \quad (3.9)$$

En particulier pour $f(x) = x$ nous obtenons

$$Q = \int_{\mathbb{R}} x dE(x). \quad (3.10)$$

2) Un spectre purement discret

Soit A un opérateur auto-adjoint sur \mathcal{H} avec un spectre purement discret

1. Une mesure (réelle) sur \mathbb{R} est une fonction μ sur tous les ensembles mesurables, Δ , avec les propriétés $\mu(\Delta) \geq 0$, $\mu(\emptyset) = 0$. Pour une suite d'ensemble disjoints, $(\Delta_k)_{k=1}^{\infty}$, $\mu(\cup_{k=1}^{\infty} \Delta_k) = \sum_{k=1}^{\infty} \mu(\Delta_k)$. Si $\mu(\mathbb{R}) = 1$, on parle d'une mesure de probabilité. Si $\mu(\Delta) \in \mathbb{C}$, on parle d'une mesure complexe.

(par exemple, l'opérateur de Hamilton pour l'oscillateur harmonique). Dans ce cas l'opérateur A possède des vecteurs propres (fonctions propres) qui forment une base orthonormée sur \mathcal{H} . Cela se voit comme suit :

Soient $-\infty < \lambda_1 < \lambda_2 < \dots$ les valeurs propres de A . Les solutions de $A\psi = \lambda_k\psi$ forment un sous-espace $\mathcal{M}_k \subset \mathcal{H}$, l'espace propre associé à la valeur propre λ_k . Les espaces propres de deux valeurs propres $\lambda_k \neq \lambda_\ell$ sont orthogonaux², $\mathcal{M}_k \perp \mathcal{M}_\ell$ et

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{k=1}^{\infty} \mathcal{M}_k. \quad (3.11)$$

Soit P_k le projecteur sur \mathcal{M}_k . L'orthogonalité des espaces propres implique

$$P_k P_\ell = \delta_{k\ell} P_k. \quad (3.12)$$

De plus, de la relation (3.11) il suit que

$$\sum_{k=1}^{\infty} P_k = \mathbb{I}. \quad (3.13)$$

Dans cet exemple nous posons pour un ensemble mesurable $\Delta \subset \mathbb{R}$

$$E^A(\Delta) = \sum_{\{k|\lambda_k \in \Delta\}} P_k. \quad (3.14)$$

C'est un exercice de vérifier que E est une mesure spectrale (c'est-à-dire E satisfait les conditions (1) à (6)). Dans ce cas, la décomposition spectrale de A est

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dE^A(\lambda) = \sum_k \lambda_k P_k. \quad (3.15)$$

Cette décomposition que nous avons fait dans deux exemples extrêmes, le spectre purement continu de Q et le spectre purement discret de A est possible pour tout opérateur auto-adjoint. Ceci est le théorème important suivant

Théorème 3.1. théorème du spectre

Il existe une relation bijective entre les opérateurs auto-adjoints A sur l'espace de Hilbert \mathcal{H} et les mesures de projection $E^A(\cdot)$ donnée par

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dE^A(\lambda). \quad (3.16)$$

2. Pour voir ceci nous considérons $\psi_k \in \mathcal{M}_k$ et $\psi_\ell \in \mathcal{M}_\ell$ avec $k \neq \ell$. Dans ce cas $\langle \psi_k, A\psi_\ell \rangle = \lambda_\ell \langle \psi_k, \psi_\ell \rangle$. De plus, comme A est auto-adjoint, on a aussi $\langle \psi_k, A\psi_\ell \rangle = \langle A\psi_k, \psi_\ell \rangle = \lambda_k \langle \psi_k, \psi_\ell \rangle$. Comme $\lambda_k \neq \lambda_\ell$ ceci est possible seulement si $\langle \psi_k, \psi_\ell \rangle = 0$.

Soit $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction (mesurable). Nous définissons $f(A)$ par l'opérateur avec la mesure spectrale $\hat{E}^A(f)$ définie par

$$\hat{E}^A(f)(\Delta) = \int_{\Delta} f dE,$$

(voir (3.8)). On trouve donc

$$E^{f(A)}(\Delta) = \hat{E}^A(f)(\Delta) = E^A(f^{-1}(\Delta)). \quad (3.17)$$

Définition 3.1. Le spectre

Le support de la mesure spectrale $E^A(\cdot)$ est le complément du plus grand ensemble ouvert $\mathcal{O} \subset \mathbb{R}$ avec $E^A(\mathcal{O}) = 0$. Le support de $E^A(\cdot)$ est le **spectre** de A dénommé $\sigma(A)$.

Les valeurs propres forment le 'spectre-point' (the point spectrum) de A .

Proposition 3.1. Valeurs propres

- (i) Soit λ_o une valeur propre de A avec $A\psi = \lambda_o\psi$ pour (au moins) un état $\psi \in \mathcal{H}$, $\psi \neq 0$. Alors $E^A(\{\lambda_o\}) \neq 0$ et $E^A(\{\lambda_o\})\mathcal{H}$ est l'espace propre de λ_o
- (ii) Inversement, si $E^A(\{\lambda_o\}) \neq 0$ alors λ_o est une valeur propre de A et son espace propre est $E^A(\{\lambda_o\})\mathcal{H}$.

Les valeurs propres de A forment le spectre-point $\sigma_p(A)$. En général il existe aussi des 'valeurs propres approximatives', c'est-à-dire des nombres $\lambda \in \mathbb{R}$ et des séries $\psi_n \in \mathcal{H}$ telles que $\lim_{n \rightarrow \infty} \|A\psi_n - \lambda\psi_n\| = 0$. Ces valeurs λ forment le 'spectre point approximatif', $\sigma_{ap}(A)$. Le complément, $\sigma(A) \setminus (\sigma_p(A) \cup \sigma_{ap}(A))$ est le spectre continu. On définit aussi le 'spectre discret' qui est composé des points isolés du spectre. Il fait parti du spectre point mais n'y est pas nécessairement identique. (Les valeurs propres doivent former un ensemble dénombrable dans un espace de Hilbert (séparable) mais pas nécessairement discret.)

Notez que, par exemple, le point 0 est dans le 'spectre point approximative' de l'opérateur de Hamilton H_H de l'atome d'hydrogène. Pour $\psi_n \equiv \psi_{n,0,0}$ un état propre avec énergie $E_n = (-1/n^2)\text{Ry}$ (voir paragraphe 1.5) on trouve

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|H_H\psi_n\| = 0.$$

En effet 0 est le seul élément de $\sigma_{ap}(H_H)$. Cependant, aussi les énergies positives font partie du spectre de l'atome d'hydrogène. Ce sont les états

de diffusion, un électron qui passe à côté d'un proton mais n'y est pas lié. Pour une discussion approfondie voir e.g. [14]. Le spectre du Hamiltonien de l'atome d'hydrogène en unités de Rydberg est donc, voir fig. 3.1

$$\begin{aligned}\sigma(H_H) &= \sigma_p(H_H) \cup \sigma_{ap}(H_H) \cup \sigma_c(H_H) \\ &= \{-1/n^2 \mid n \in \mathbb{N}\} \cup \{0\} \cup \mathbb{R}_+.\end{aligned}\quad (3.18)$$

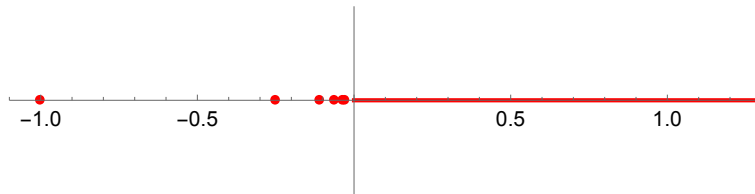


FIGURE 3.1 – Le spectre du Hamiltonien pour l'atome d'hydrogène en unités de Rydberg ($1\text{Ry} \simeq 13.6\text{eV}$).

Notez aussi que des valeurs d'attente de l'énergie ne sont pas nécessairement dans le spectre de H_H . Par exemple, si l'état d'un électron est la superposition

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{100} + \psi_{200}),$$

nous trouvons pour la valeur d'attente de l'énergie

$$\begin{aligned}\langle \psi | H_H | \psi \rangle &= \frac{1}{2} \langle (\psi_{100} + \psi_{200}) | H_H | (\psi_{100} + \psi_{200}) \rangle \\ &= -\frac{1}{2} \text{Ry} \langle (\psi_{100} + \psi_{200}) | (\psi_{100} + \frac{1}{4} \psi_{200}) \rangle = -\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{4} \right) \text{Ry} \\ &= -\frac{5}{8} \text{Ry}.\end{aligned}\quad (3.19)$$

Cependant, $-5/8\text{Ry}$ n'est pas dans le spectre de H_H . Un opérateur peut donc prendre des valeurs d'attente qui ne sont pas dans le spectre. (Ceci n'est pas si surprenant. Par exemple, la valeur moyenne d'enfants d'une femme suisse est environs 1.54, mais aucune femme n'a vraiment 1.54 enfants.)

Dans la littérature physique on trouve souvent la notation dite 'de Dirac'

purement formelle

$$A = \int da |\psi_a\rangle a \langle \psi_a| \quad \text{avec} \quad (3.20)$$

$$A|\psi_a\rangle = a|\psi_a\rangle \quad \text{et} \quad (3.21)$$

$$f(A) = \int da |\psi_a\rangle f(a) \langle \psi_a| \quad (3.22)$$

$$\mathbb{I} = \int da |\psi_a\rangle \langle \psi_a|. \quad (3.23)$$

$$(3.24)$$

$$(3.25)$$

Ici l'opérateur $|\psi_a\rangle \langle \psi_a|$ est la mesure spectrale de A . Pour un pur spectre-point cette notation a un sens relativement clair et les $|\psi_a\rangle$ sont les vecteurs propres avec la valeur propre a . Pour un opérateur qui a un spectre (partiellement) continu, pour les valeurs a dans le spectre continu il n'existe en général pas d'état $|\psi_a\rangle$ avec $A|\psi_a\rangle = a|\psi_a\rangle$.

3.2 Relation d'incertitude généralisée

Nous considérons une observable A . Sa variance dans l'état ψ est

$$\begin{aligned} (\Delta A)_\psi^2 &= \langle \psi | (A - \langle \psi | A | \psi \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - (\langle \psi | A | \psi \rangle)^2 \\ &= \langle A \psi | A \psi \rangle - (\langle \psi | A | \psi \rangle)^2 = \|A\psi\|^2 - (\langle \psi | A | \psi \rangle)^2 \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} &= \langle (A - \langle \psi | A | \psi \rangle \mathbb{I}) \psi | (A - \langle \psi | A | \psi \rangle \mathbb{I}) \psi \rangle = \| [A - \langle \psi | A | \psi \rangle] \psi \|^2 \\ (\Delta A)_\psi &= \| [A - \langle \psi | A | \psi \rangle \mathbb{I}] \psi \|. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Proposition 3.2. *Soient A et B deux observables sur un espace de Hilbert. Alors*

$$(\Delta A)_\psi (\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|. \quad (3.28)$$

Preuve. *Pour simplifier la notation nous définissons les opérateurs $\hat{A} = A - \langle \psi | A | \psi \rangle \mathbb{I}$ et $\hat{B} = B - \langle \psi | B | \psi \rangle \mathbb{I}$. Notez que $[\hat{A}, \hat{B}] = [A, B]$. Pour $\alpha \in \mathbb{R}$*

$$\begin{aligned} 0 \leq \|(\hat{A} + i\alpha \hat{B})\psi\|^2 &= (\Delta A)_\psi^2 + \alpha^2 (\Delta B)_\psi^2 + \alpha i (\langle A\psi, B\psi \rangle - \langle B\psi, A\psi \rangle) \\ &= (\Delta A)_\psi^2 + \alpha^2 (\Delta B)_\psi^2 + \alpha i \langle \psi, [A, B] \psi \rangle. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Ceci est une expression réelle³ quadratique en α et sans racine réelle simple. Son discriminant doit donc être non-positif,

$$-\langle \psi, [A, B]\psi \rangle^2 - 4(\Delta A)_\psi^2 (\Delta B)_\psi^2 \leq 0 \quad (3.30)$$

$$4(\Delta A)_\psi^2 (\Delta B)_\psi^2 \geq -\langle \psi, [A, B]\psi \rangle^2 \quad (3.31)$$

$$(\Delta A)_\psi (\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle \psi, [A, B]\psi \rangle|. \quad (3.32)$$

Pour le dernier signe d'inégalité nous utilisons que $\langle \psi, [A, B]\psi \rangle$ est purement imaginaire donc $\langle \psi, [A, B]\psi \rangle^2$ est négatif. \square

En posant $A = q$ et $B = p$ on obtient le cas particulier de la relation d'incertitude de Heisenberg.

On appelle deux opérateurs 'compatibles' si ils commutent, $[A, B] = 0$. Seul dans ce cas, on peut mesurer leur valeur (en principe) avec une précision illimitée. Si les spectres de deux opérateurs compatibles sont des pures spectres-point, on peut montrer (comme dans le cas de dimension finie) qu'il existe une base de vecteurs propres des deux opérateurs, c'est-à-dire on peut les diagonaliser simultanément (voir exercices, série 6). Un exemple relevant de ceci est donné par le moment cinétique que nous discutons dans le prochain chapitre.

3.3 Mesure idéale et réduction d'état

Dans ce paragraphe nous généralisons la discussion de la section 2.5.1.

Nous considérons un système S dans un état ψ . Quand nous effectuons la mesure d'une observable A sur ce système, il change son état $\psi \rightarrow \psi'$ (réduction de la fonction d'onde). Ce changement est dû à l'interaction du système avec l'appareil de mesure. Cet interaction implique que les observables non-compatibles avec A auront des variances plus importantes après la mesure si la variance de A est réduite.

Ici nous ne voulons traiter que le cas le plus simple d'une mesure idéale. Un résultat de la mesure de A dans $\Delta \subset \mathbb{R}$ implique les deux conséquences suivantes :

- (i) Si nous faisons une deuxième mesure de A nous trouvons une valeur dans Δ avec certitude, $W_{\psi'}^A(\Delta) = \langle \psi', E^A(\Delta)\psi' \rangle = 1$.

3. Comme A et B sont des opérateurs auto-adjoints, $\overline{\langle \psi, [A, B]\psi \rangle} = \langle [A, B]\psi, \psi \rangle = \langle (AB - BA)\psi, \psi \rangle = \langle \psi, (BA - AB)\psi \rangle = \langle \psi, [B, A]\psi \rangle = -\langle \psi, [A, B]\psi \rangle$. Ceci implique que $\langle \psi, [A, B]\psi \rangle$ est purement imaginaire.

- (ii) Dans le nouvel état ψ' , des mesures 'plus fines' par rapport à l'observable $E^A(\Delta)$ restent inchangées. C'est-à-dire, si P est un projecteur $P \leq E^A(\Delta)$ nous demandons⁴

$$\frac{\langle \psi', P\psi' \rangle}{\langle \psi', E^A(\Delta)\psi' \rangle} = \frac{\langle \psi, P\psi \rangle}{\langle \psi, E^A(\Delta)\psi \rangle}. \quad (3.33)$$

La mesure idéale est alors défini comme celle qui apporte l'états ψ sur

$$\psi' = \frac{E^A(\Delta)\psi}{\|E^A(\Delta)\psi\|}. \quad (3.34)$$

Evidemment (3.34) satisfait les conditions (i) et (ii).

La formule (3.34) est une généralisation de (2.73). L'état réduit est donc simplement la projection de l'état original sur la partie de l'espace de Hilbert dans laquelle A a des valeurs dans Δ .

3.4 Etats mixtes, l'opérateur densité

Souvent, particulièrement en physique statistique, nous n'avons pas toute l'information sur notre système. Nous ne savons pas exactement dans quel état se trouve le système mais nous pouvons calculer les probabilités qu'il soit dans un état donné. Dans cette situation il est utile de généraliser la notion d'état. Pour ceci nous considérons un système orthonormé d'états ψ_k et les projecteurs sur ces états, P_k . Nous supposons que notre système est avec probabilité p_k dans l'état ψ_k . Comme les ψ_k génèrent tout \mathcal{H} il faut que

$$0 \leq p_k \leq 1, \quad \sum_k p_k = 1. \quad (3.35)$$

Nous définissons **l'opérateur densité**

$$\rho = \sum_k p_k P_k. \quad (3.36)$$

Dans cette situation, la valeur d'attente d'une observable A est donnée par⁵

$$\langle A \rangle_\rho = \sum_k p_k \langle \psi_k, A\psi_k \rangle = \sum_k p_k \text{tr}(AP_k) = \text{tr}(A\rho) = \text{tr}(\rho A). \quad (3.37)$$

L'opérateur ρ a les propriétés suivantes

4. Pour deux projecteurs P et Q on utilise la notation $P \leq Q$ si $P\mathcal{H} \subseteq Q\mathcal{H}$.

5. Tout est toujours bien défini si A est borné, sinon il faut encore demander que les états ψ_k soient dans le domaine de définition de A .

- (i) ρ est positif et hermitien : $\rho \geq 0$ et $\rho^* = \rho$;
- (ii) ρ est de la classe trace (c'est-à-dire $\text{tr}\rho < \infty$) et $\text{tr}\rho = 1$.

D'autre part on peut démontrer qu'un opérateur qui satisfait (i) et (ii) est de la forme (3.36) pour une base orthonormée $(\psi_k)_k$.

Exercice Montrer qu'un état mixte ρ est un état pur ($\rho = P_k$) si et seulement si $\rho^2 = \rho$.

3.5 Union de deux systèmes quantiques

Ici nous généralisons la situation de la mécanique ondulatoire : l'espace de Hilbert pour une particule est donné par $L^2(\mathbb{R}^3)$ tandis que l'espace de Hilbert pour deux particules est $L^2(\mathbb{R}^6) = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$. Nous considérons en général deux espaces de Hilbert \mathcal{H} et \mathcal{H}' et considérons leur produit tensoriel $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$. Pour deux éléments de la forme $\phi \otimes \phi'$ et $\psi \otimes \psi'$ le produit scalaire dans $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ est défini comme

$$\langle \phi \otimes \phi', \psi \otimes \psi' \rangle_{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'} = \langle \phi, \psi \rangle_{\mathcal{H}} \cdot \langle \phi', \psi' \rangle_{\mathcal{H}'}. \quad (3.38)$$

La notion du produit tensoriel sur des espaces Hilbert de dimension infinie admet aussi des sommes infinies de produits. Plus précisément, soient $(\phi_k)_k$ une base orthonormée de l'espace de Hilbert \mathcal{H} et $(\phi'_k)_k$ une base orthonormée de l'espace de Hilbert \mathcal{H}' . Alors les produits $(\phi_j \otimes \phi'_k)_{jk}$ forment une base orthonormée de $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$, et chaque élément $\psi \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ peut être écrit dans cette base comme

$$\psi = \sum_{ij} \alpha_{ij} \phi_i \otimes \phi'_j, \quad \alpha_{ij} \in \mathbb{C}, \quad \|\psi\|^2 = \sum_{ij} |\alpha_{ij}|^2 < \infty. \quad (3.39)$$

Pour des opérateurs A et A' sur \mathcal{H} et \mathcal{H}' nous définissons le produit tensoriel par

$$(A \otimes A')(\phi \otimes \phi') = (A\phi) \otimes (A'\phi'). \quad (3.40)$$

A toute observable A du système décrit par \mathcal{H} nous pouvons attribuer l'observable $A \otimes \mathbb{I}$ sur $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ et de même à une observable A' du système décrit par \mathcal{H}' nous attribuons $\mathbb{I} \otimes A'$ sur $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$. Ceci est raisonnable car pour une mesure qui, par exemple, ne concerne que le sous-système \mathcal{H} d'un opérateur A sur \mathcal{H} nous obtenons

$$\begin{aligned} W_{\psi \otimes \psi'}^{A \otimes \mathbb{I}}(\Delta) &= \langle \psi \otimes \psi', (E^A(\Delta) \otimes \mathbb{I})\psi \otimes \psi' \rangle \\ &= \langle \psi, E^A(\Delta)\psi \rangle \langle \psi', \psi' \rangle = W_{\psi}^A(\Delta). \end{aligned} \quad (3.41)$$

3.6 Symétries, dynamique, quantités conservées

3.6.1 Automorphismes de Wigner

En mécanique quantique, les symétries sont encore plus importantes qu'en mécanique classique comme nous le verrons. Les transformations canoniques de la mécanique classique correspondent aux automorphismes de Wigner en mécanique quantique.

Définition 3.2. *Un automorphisme de Wigner est une application α sur les états et les observables, $\alpha : [\psi] \mapsto \alpha([\psi])$ et $A \mapsto \alpha(A)$ telle que*

(i) $[\psi] \mapsto \alpha([\psi])$ est bijective,

(ii) $W_{\alpha([\psi])}^{\alpha(A)}(\Delta) = W_{[\psi]}^A(\Delta)$ pour tout $\Delta \subset \mathbb{R}$, mesurable.

(Ici $W_{[\psi]}^A = W_{\psi}^A$ pour n'importe quel état $\psi \in [\psi]$.)

Un automorphisme ne change donc ni les normes des états ni les probabilités. Pour les raies unitaires nous définissons

$$([\psi], [\phi]) := |\langle \psi, \phi \rangle|, \quad \psi \in [\psi], \quad \phi \in [\phi]. \quad (3.42)$$

Evidemment $([\psi], [\phi])$ est indépendant des représentants ψ, ϕ . On peut démontrer [14] que les automorphismes de Wigner sont les bijections des raies unitaires qui satisfont

$$(\alpha([\psi]), \alpha([\phi])) = ([\psi], [\phi]). \quad (3.43)$$

Exemples importants :

1) Soit U un opérateur unitaire sur \mathcal{H} . C'est-à-dire U est un opérateur linéaire avec $U^*U = UU^* = \mathbb{1}$. Nous avons donc $\langle U\psi, U\phi \rangle = \langle \psi, \phi \rangle$ pour tout $\psi, \phi \in \mathcal{H}$. Pour des états $[\psi]$ et des observables B nous posons

$$[U] : [\psi] \mapsto [U\psi] \quad \text{et} \quad [U]B = UBU^*. \quad (3.44)$$

$[U]$ est évidemment un automorphisme de Wigner.

2) Soit A un opérateur anti-unitaire sur \mathcal{H} . C'est-à-dire A est un opérateur anti-linéaire, $A(a\phi + b\psi) = \bar{a}A\phi + \bar{b}A\psi$ pour $a, b \in \mathbb{C}$ et $\phi, \psi \in \mathcal{H}$. De plus $\langle A\psi, A\phi \rangle = \langle \psi, \phi \rangle$ pour tout $\psi, \phi \in \mathcal{H}$. Nous posons

$$[A] : [\psi] \mapsto [A\psi], \quad \text{et} \quad [A]B = ABA^* \dots \quad (3.45)$$

Théorème 3.2. (Wigner)

Tout automorphisme de Wigner est de la forme

$$\alpha([\phi]) = [U\phi], \quad \text{et} \quad [U]B = UBU^*. \quad (3.46)$$

pour un opérateur U qui est unitaire ou anti-unitaire.

La preuve de ce théorème n'est pas simple. Il se trouve par exemple dans nos deux références [10, 11].

3.6.2 Dynamique

Nous considérons un système fermé. Le système est dans l'état $[\psi]$, à $t = 0$ et dans l'état $[\psi]_t$ à l'instant t . Pour tout temps t il existe alors un automorphisme de Wigner, α_t avec

$$[\psi]_t = \alpha_t([\psi]) . \quad (3.47)$$

Nous demandons la propriété de groupe pour α_t ,

$$\alpha_t \circ \alpha_s = \alpha_{t+s} . \quad (3.48)$$

Ceci implique en effet déjà l'existence d'un opérateur d'évolution unitaire, $U(t)$.

Théorème 3.3. *Soit α_t , $t \in \mathbb{R}$ un groupe d'automorphisme de Wigner. Alors il existe un groupe d'opérateurs unitaires, $U(t)$, $U(t)U(s) = U(t+s)$ tels que*

$$\alpha_t = [U(t)] . \quad (3.49)$$

A une phase constante près, ce groupe est unique.

Qu'il existe des opérateurs unitaires avec

$$\alpha_t = [U(t)] \quad \text{et} \quad U(t)U(s) = \exp(i\varphi(s,t))U(s+t)$$

pour une phase $\varphi(s,t)$ est facile à démontrer. Par contre, il n'est pas évident qu'on puisse éliminer cette phase. La preuve de ce théorème peut être trouvée dans [10].

Après ceci, on a le théorème fondamental de Stone.

Théorème 3.4. Stone

Soit $t \mapsto U(t)$ une représentations de \mathbb{R} dans les opérateurs unitaires sur un espace de Hilbert \mathcal{H} (qui est fortement continue, c'est à dire $t \mapsto U(t)\psi$ est continue pour tout $\psi \in \mathcal{H}$). Alors il existe un opérateur auto-adjoint H avec

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)^n . \quad (3.50)$$

La preuve se trouve par exemple dans [10, 11].

Pour $\psi \in [\psi]$ il existe alors un $\psi_t \in [\psi]_t$ tel que

$$\psi_t = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi, \text{ et donc } \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_t = H\psi_t.} \quad (3.51)$$

Ceci est la forme générale de l'équation de Schrödinger et H est l'opérateur de Hamilton qui détermine l'évolution dynamique des états.

3.6.3 Observables conservées

Soit A une observable conservée sous l'évolution temporelle $\psi_t = U(t)\psi$ pour toute condition initiale ψ . Alors pour tout $\Delta \subset \mathbb{R}$

$$\langle \psi_t, E^A(\Delta)\psi_t \rangle = \langle \psi, U^*(t)E^A(\Delta)U(t)\psi \rangle = \langle \psi, E^A(\Delta)\psi \rangle \quad \forall \psi \in \mathcal{H} \quad (3.52)$$

donc

$$E^A(\Delta) = U^*(t)E^A(\Delta)U(t). \quad (3.53)$$

La dérivation par rapport à t donne aussi

$$[H, E^A(\Delta)] = 0 \quad (3.54)$$

et en particulier

$$[H, A] = 0. \quad (3.55)$$

Nous pouvons aussi travailler avec une définition plus élémentaire d'une observable conservée : Une observable est conservée sous l'évolution $\psi_t = \exp(-i/\hbar Ht)\psi$ si

$$\partial_t \langle \psi_t, A\psi_t \rangle = 0 \quad (3.56)$$

pour tout état initial ψ . Dans ce cas

$$\begin{aligned} 0 &= \partial_t \langle \psi_t, A\psi_t \rangle|_{t=0} = \langle -(i/\hbar)H\psi, A\psi \rangle + \langle H\psi, A - (i/\hbar)H\psi \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}(\langle H\psi, A\psi \rangle - \langle \psi, AH\psi \rangle) = \frac{i}{\hbar}\langle \psi, [H, A]\psi \rangle \end{aligned} \quad (3.57)$$

pour tout $\psi \in \mathcal{H}$. Pour le dernier signe d'égalité pour avons utilisée que H est auto-adjoint. Nous voulons encore démontrer que un opérateur B qui satisfait $\langle \psi, B\psi \rangle = 0$ pour tout $\psi \in \mathcal{H}$ est identiquement zéro. Pour ceci nous employons $\langle \psi, B\psi \rangle = 0$ sur les état $\psi + \phi$ et $\psi + i\phi$ ce qui donne

$$0 = \langle (\psi + \phi), B(\psi + \phi) \rangle = \langle \psi, B\psi \rangle + \langle \phi, B\psi \rangle \quad (3.58)$$

$$0 = \langle (\psi + i\phi), B(\psi + i\phi) \rangle = i\langle \psi, B\psi \rangle - i\langle \phi, B\psi \rangle \quad (3.59)$$

La somme de la première équation plus i fois la deuxième donne

$$0 = \langle \phi, B\psi \rangle$$

et ceci pour tout $\phi, \psi \in \mathcal{H}$, ce qui implique $B = 0$.

Pour l'application qui suit nous devons encore démontrer que H commute aussi avec tout projecteur sur un espace propre de notre observable conservée A . Soit a une valeur propre de A avec espace propre \mathcal{M} et soit \mathcal{M}^\perp son complément orthogonal tel que $\mathcal{H} = \mathcal{M} \oplus \mathcal{M}^\perp$. Soit $\psi \in \mathcal{M}$. Comme $[H, A] = 0$, $AH\psi = HA\psi = aH\psi$, donc aussi $H\psi \in \mathcal{M}$. En plus, pour $\phi \in \mathcal{M}^\perp$ et $\psi \in \mathcal{M}$, ceci implique $0 = \langle H\psi, \phi \rangle = \langle \psi, H\phi \rangle$, donc aussi $H\phi \in \mathcal{M}^\perp$. Soit alors P le projecteur sur \mathcal{M} . Donc pour un $\chi \in \mathcal{H}$ quelconque qui est de la forme $\chi = \psi + \phi$ avec $\psi \in \mathcal{M}$ et $\phi \in \mathcal{M}^\perp$ nous avons $P\chi = \psi$ et comme $H\chi = H\psi + H\phi$ est la décomposition de $H\chi$ en ses parties en \mathcal{M} et \mathcal{M}^\perp , nous trouvons $HP\chi = H\psi$ et aussi $PH\chi = H\psi$ donc $HP = PH$.

Application :

Soit A une observable conservée sous l'évolution et a une valeur propre de A avec espace propre \mathcal{M} . Pour $\psi \in \mathcal{M}$, comme aussi $H\psi \in \mathcal{M}$, et comme $P = E^A(\{a\})$, (ou en utilisant l'argument élémentaire en haut) $[H, P] = 0$ et

$$PHP = HP = PH. \quad (3.60)$$

Comme aussi le projecteur $Q = \mathbb{I} - P$ sur l'espace orthogonal \mathcal{M}^\perp commute avec H , nous obtenons avec $PQ = QP = 0$

$$H = (P + Q)H(P + Q) = PHP + QHQ. \quad (3.61)$$

Cette équation nous dit que nous pouvons réduire H sur \mathcal{M} et sur \mathcal{M}^\perp et l'étudier l'évolution dans chacun de ces sous-espace de \mathcal{H} séparément. Avec H aussi tous H^n et donc $\exp(-\frac{i}{\hbar}Ht)$ commute avec P et donc ψ_t reste dans \mathcal{M} si $\psi_0 \in \mathcal{M}$. De même, pour $\phi_0 \in \mathcal{M}^\perp$, ϕ_t reste dans \mathcal{M}^\perp .

Des exemples importants d'observables conservées sont les générateurs de symétries à un paramètre. Nous allons revenir à des exemple concrets dans le prochain chapitre.

3.7 Représentations de Schrödinger, Heisenberg et interaction

Jusqu'ici nous avons utilisé la *représentation de Schrödinger* pour l'évolution. Dans cette représentation c'est l'état ψ_t qui évolue dans le temps tandis

que les observables (s'ils n'ont pas de dépendance temporelle explicite, par exemple par un champ externe qui dépendrait du temps) restent indépendantes du temps. Cependant, les seules quantités qui sont mesurables, et donc importantes, sont les valeurs d'attente des observables ou leur distribution de probabilité dans les états. Dans la *représentation de Heisenberg* on choisit les états indépendants du temps et on absorbe la dépendance du temps dans les observables.

Soit $\psi_t = U(t)\psi$ la dépendance du temps d'un état dans la représentation de Schrödinger. Pour une observable A , la probabilité de trouver sa valeur dans un ensemble $\Delta \subset \mathbb{R}$ est

$$\begin{aligned} W_{\psi_t}^A(\Delta) &= \langle \psi_t, E^A(\Delta)\psi_t \rangle = \langle U(t)\psi, E^A(\Delta)U(t)\psi \rangle = \langle \psi, U^*(t)E^A(\Delta)U(t)\psi \rangle \\ &= \langle \psi, E^{U^*(t)AU(t)}(\Delta)\psi \rangle, \quad \text{donc} \end{aligned} \quad (3.62)$$

$$W_{\psi_t}^A(\Delta) = W_{\psi}^{U^*(t)AU(t)}(\Delta). \quad (3.63)$$

Dans la représentation de Heisenberg nous posons $\psi_H \equiv \psi$ et

$$\boxed{A_H(t) = U^*(t)AU(t)}. \quad (3.64)$$

Nous indiquons les états et les observables dans la représentation de Heisenberg avec un indice H (mais nous n'indiquons pas la représentations Schrödinger avec un S). Par construction

$$\langle \psi_H A_H(t)\psi_H \rangle = \langle \psi_t A \psi_t \rangle. \quad (3.65)$$

Nous dérivons une équation d'évolution pour les observables dans la représentation de Heisenberg. Pour ceci nous utilisons que

$$\dot{U}(t) = -\frac{i}{\hbar}HU(t) = -\frac{i}{\hbar}U(t)H. \quad (3.66)$$

Avec $U^*(t) = U^{-1}(t) = U(-t)$ nous obtenons

$$\begin{aligned} \dot{A}_H(t) &= -\dot{U}(-t)AU(t) + U(-t)A\dot{U}(t) = \frac{i}{\hbar}U(-t)(HA - AH)U(t) \\ &= \frac{i}{\hbar}(HU(-t)AU(t) - U(-t)AU(t)H) = \frac{i}{\hbar}[H, A_H(t)]. \end{aligned} \quad (3.67)$$

La dérivée temporelle d'un opérateur dans la représentation de Heisenberg est donc

$$\boxed{\dot{A}_H(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A_H(t)]} \quad (3.68)$$

Il suit alors que A_H est conservée sous l'évolution temporelle due à H , si et seulement si $[H, A_H] = 0$, et comme H commute avec $U(t)$ ceci est équivalent à $[H, A] = 0$.

Si on transfère une partie de l'évolution temporelle sur les observables on trouve la dite *représentation d'interaction*. Ceci est utile si H est de la forme

$$H = H_0 + H_1, \quad (3.69)$$

Avec un H_0 dont nous connaissons la solution $U_0(t)$ exactement et un H_1 qui est une petite perturbation. Par exemple l'oscillateur harmonique avec une perturbation, ou l'interaction entre les électrons dans un atome.

Soit

$$U_0(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0t\right) \quad (3.70)$$

l'opérateur d'évolution associé à H_0 . Dans la représentations d'interaction nous posons

$$A_I(t) = U_0(-t)AU_0(t), \psi_I(t) = U_0(-t)\psi_t = U_0(-t)U(t)\psi_H. \quad (3.71)$$

En particulier H_1 devient dans la représentation d'interaction

$$H_{1I} = U_0(-t)H_1U_0(t). \quad (3.72)$$

L'équation d'évolution pour ψ_I devient

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\psi}_I &= U_0(-t)(-H_0 + (H_0 + H_1))U(t)\psi_H \\ &= U_0(-t)H_1U_0(t)U_0(-t)U(t)\psi_H = H_{1I}\psi_I. \end{aligned} \quad (3.73)$$

De même nous trouvons

$$\dot{A}_I = \frac{i}{\hbar}U_0(-t)(H_0A - AH_0)U_0(t) = \frac{i}{\hbar}[H_0, A_I].$$

ou plus simplement

$$\boxed{\dot{A}_I = \frac{i}{\hbar}[H_0, A_I].} \quad (3.74)$$

Nous déterminons encore l'évolution de l'opérateur densité. Dans la représentation de Heisenberg, avec les états, cet opérateur est indépendant du temps. Dans la représentation de Schrödinger, on a

$$\rho_0 = \sum_i p_i e_i = \rho_H \quad (3.75)$$

$$\rho_t = \sum_i p_i U(t) e_i U^*(t) \quad (3.76)$$

tel que $\rho_t \psi_t = U(t) (\rho_0 \psi_0)$.

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_\rho &= \text{tr}(\rho_H A_H) = \text{tr}(\rho_H U^*(t) A U(t)) = \text{tr}(U(t) \rho_H U^*(t) A) \\ &= \text{tr}(\rho_i A) \quad \text{avec} \end{aligned} \quad (3.77)$$

$$\rho = U(t) \rho_H U^*(t). \quad (3.78)$$

Ceci est l'opérateur densité dans la **représentation de Schrödinger**. Notez la différence avec (3.64)! Aussi dans la dérivée temporelle on a pour cette raison le signe opposé,

$$\boxed{\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]}. \quad (3.79)$$

Ceci est l'analogie quantique à l'équation de Liouville de la mécanique classique.

TABLE 3.1 – Comparaison entre la mécanique classique et la mécanique quantique. Ici $\{\cdot, \cdot\}$ dénomme le crochet de Poisson de la mécanique classique et $[\cdot, \cdot]$ dénomme le commutateur de la mécanique quantique.

Quantité	Classique	Quantique
états purs mixés	points dans l'espace de phase $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in U \subset \mathbb{R}^{2n}$ distribution de probabilité sur l'espace de phase $d\mu = \rho(\mathbf{q}, \mathbf{p})d^nq d^n p$	raies unitaires $[\psi]$ d'un espace de Hilbert, $\psi \in \mathcal{H}$, opérateur densité sur \mathcal{H} $\rho : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, $\rho^* = \rho$, $\text{tr}\rho = 1$.
observable	fonction (continue) $f : U \rightarrow \mathbb{R}$	opérateur auto-adjoint $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$
mesure pur mixtes	valeur $f(\mathbf{x})$ $\bar{f} = \int_U f(\mathbf{x})d\mu$	valeur d'attente $\langle \psi A \psi \rangle$ $\langle A \rangle_\rho = \text{tr}(\rho A)$.
Evolution temporel évolution des observables état mixte	$\mathbf{x}(t) = \Phi_t(\mathbf{x})$ est le flux du champ vectoriel Hamiltonien $X_H = \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}\right)$ $\dot{f}(\mathbf{x}(t)) = \nabla f \cdot X_H = \{f, H\} =$ $\partial f / \partial \mathbf{q} \cdot \partial H / \partial \mathbf{p} - \partial f / \partial \mathbf{p} \cdot \partial H / \partial \mathbf{q}$ $\dot{\rho} = \{H, \rho\}$	$\psi_t = U(t)\psi$ où $U(t) = \exp(-iHt/\hbar)$ est unitaire $i\hbar\partial_t\psi = H\psi$ Heisenberg : $\dot{A} = -(i/\hbar)[A, H]$ $\dot{\rho} = -(i/\hbar)[H, \rho]$.
Crochets En général	$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$ $\{\bullet, \bullet\}$	$[q_i, p_j] = -(\hbar/i)\delta_{ij}$ $-(i/\hbar)[\bullet, \bullet]$

Chapitre 4

Des particules avec moment cinétique, le spin

4.1 Invariance sous rotation et moment cinétique pour des particules sans spin

Nous commençons par considérer l'action du groupe des rotations sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$, l'espace des fonctions d'ondes scalaire que nous avons considérées jusqu'ici.

A toute rotation $R \in SO(3)$ correspond l'opérateur $U(R)$ sur \mathcal{H} défini par

$$(U(R)\psi)(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x}). \quad (4.1)$$

Comme $\det R = 1$, nous trouvons $\langle U(R)\psi | U(R)\phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle$, donc $R \mapsto U(R)$ est une représentation unitaire.

Nous considérons alors les sous-groupes à un paramètre $R(\mathbf{n}, \beta)$ de rotations autour de d'une axe \mathbf{n} fixé, avec $\mathbf{n}^2 = 1$, d'un angle β . Comme nous l'avons déjà vu en mécanique II, la rotation est

$$R(\mathbf{n}, \beta)(\mathbf{x}) = \sin(\beta) \mathbf{n} \times \mathbf{x} - \cos(\beta) \mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{x}) + \mathbf{n} \cdot (\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}). \quad (4.2)$$

La propriété de groupe donne

$$\frac{d}{d\beta} R(\mathbf{n}, \beta) = \Omega R(\mathbf{n}, \beta) \quad \text{avec} \quad \Omega := \left. \frac{d}{d\beta} \right|_{\beta=0} R(\mathbf{n}, \beta). \quad (4.3)$$

Avec (4.2) nous trouvons

$$\Omega \mathbf{x} = \mathbf{n} \times \mathbf{x} \quad \text{et donc} \quad \Omega_{ij} = \sum_{\ell} \epsilon_{i\ell j} n_{\ell} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{I} \quad \text{où} \quad (4.4)$$

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad (I_k)_{\ell j} = \epsilon_{\ell k j}, \quad (4.5)$$

$$I_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

De l'éq. (4.3) nous concluons

$$R(\mathbf{n}, \beta) = \exp(\beta \mathbf{n} \cdot \mathbf{I}). \quad (4.7)$$

Les I_ℓ sont les 'générateurs infinitésimaux' des rotation autour des axes \mathbf{e}_ℓ . Elles forment une base de l'algèbre de Lie de $SO(3)$.

Définition 4.1. Soit $G \subset GL(n, \mathbb{C})$ un groupe de matrices. Toutes les matrices de la forme $N \in \mathbb{C}^{n \times n}$ qui sont des dérivées à l'identité d'un sous-groupe à un paramètre de G forment l'algèbre de Lie du groupe G qui est appelée \mathcal{G} .

C'est-à-dire pour un sous-groupe à un paramètre, $g(\beta) \in G$, donc $g(\beta_1)g(\beta_2) = g(\beta_1 + \beta_2)$ on a

$$\left. \frac{d}{d\beta} \right|_{\beta=0} g(\beta) = \mathbf{g} \in \mathcal{G}. \quad (4.8)$$

Dans le langage des variétés différentielles, \mathcal{G} est l'espace tangent de G à l'identité, $\mathcal{G} = T_e G$. Ceci est un espace vectoriel de la même dimension que celle du groupe. Pour \mathbf{g} et $\mathbf{h} \in \mathcal{G}$, on a donc aussi $\lambda \mathbf{g} + \mathbf{h} \in \mathcal{G}$. De plus, le commutateur satisfait $[\mathbf{g}, \mathbf{h}] = \mathbf{g}\mathbf{h} - \mathbf{h}\mathbf{g} \in \mathcal{G}$. Dans l'appendice A.6 nous dérivons certains résultats sur les groupes et les algèbres de Lie.

L'algèbre de Lie du groupe $SO(3)$ est dénommée $so(3)$. Elle est donc donnée par toutes les matrices de la forme $\mathbf{x} \cdot \mathbf{I}$,

$$so(3) = \{M = \mathbf{x} \cdot \mathbf{I} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3\}. \quad (4.9)$$

Evidemment ceci est un espace vectoriel de dimension 3. Comme

$$R^{-1}(\mathbf{n}, \beta) = R(\mathbf{n}, -\beta) = \exp(-\beta \mathbf{n} \cdot \mathbf{I}) = R^T(\mathbf{n}, \beta) = \exp(\beta \mathbf{n} \cdot \mathbf{I}^T).$$

il suit que

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{I}^T = -\mathbf{n} \cdot \mathbf{I} \quad \text{donc} \quad M^T = -M \quad \text{pour} \quad M \in so(3) \quad (4.10)$$

ce qui est aussi une simple conséquence de (4.6). C'est-à-dire, $so(3)$ est l'espace des matrices de type $\mathbb{R}^{3 \times 3}$ qui sont anti-symétriques. De plus,

$$1 = \det R(\mathbf{n}, \beta) = \det \exp(\beta \mathbf{n} \cdot \mathbf{I}) = \exp(\beta \text{tr}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{I}))$$

par conséquent

$$\text{tr}(M) = 0 \quad \text{pour } M \in so(3). \quad (4.11)$$

Cependant, ceci est le cas pour toute matrice anti-symétrique car $M_{ii} = -M_{ii} = 0$ et ça n'ajoute donc pas de nouvelle condition.

Pour les relations de commutation il est facile de vérifier que

$$[I_i, I_j] = \sum_k \epsilon_{ijk} I_k \quad \text{ce qu'est équivalent à } [\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{I}, \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{I}] = (\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2) \cdot \mathbf{I}. \quad (4.12)$$

Pour \mathbf{n} fixé, $U(R(\mathbf{n}, \beta))$ est un groupe d'opérateurs unitaires à un paramètre. D'après le théorème de Stone 3.4, il existe alors un opérateur auto-adjoint, $L(\mathbf{n})$, sur \mathcal{H} avec

$$U(R(\mathbf{n}, \beta)) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\beta L(\mathbf{n})\right). \quad (4.13)$$

Pour le trouver nous dérivons les deux côtés appliqué à $\psi \in \mathcal{H}$ par rapport à β ,

$$L(\mathbf{n})\psi = i\hbar \left. \frac{d}{d\beta} \right|_{\beta=0} U(R(\mathbf{n}, \beta))\psi \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} &= i\hbar \left. \frac{d}{d\beta} \right|_{\beta=0} \psi(R^{-1}(\mathbf{n}, \beta)\mathbf{x}) = i\hbar \nabla \psi(\mathbf{x}) \left. \frac{d}{d\beta} \right|_{\beta=0} R(\mathbf{n}, -\beta)\mathbf{x} \\ &= i\hbar \nabla \psi(\mathbf{x}) \cdot (-\mathbf{n} \times \mathbf{x}) = \frac{\hbar}{i} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{x} \times \nabla \psi). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Ceci donne

$$\boxed{L(\mathbf{n}) = \mathbf{n} \cdot \mathbf{L} \quad \text{avec } \mathbf{L} = \frac{\hbar}{i}(\mathbf{x} \times \nabla \psi)}. \quad (4.16)$$

Notez qu'on obtient ce résultat aussi par correspondance du moment cinétique de la mécanique classique,

$$\mathbf{L}^{(\text{classique})} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} \mapsto \frac{\hbar}{i}(\mathbf{x} \times \nabla) = \mathbf{L}^{(\text{quantique})}. \quad (4.17)$$

Avec ceci nous avons interprété le moment cinétique orbitale de la mécanique quantique comme le générateur des rotations. Nous avons aussi vu que la représentation U du groupe de rotation induit une représentation U_* de l'algèbre $so(3)$ qui est définie par

$$U(R(\mathbf{n}, \beta))\psi = \exp(\beta \mathbf{n} \cdot U_*(\mathbf{I}))\psi, \quad (4.18)$$

telle que

$$U_*(I_\ell) = -\frac{i}{\hbar}L_\ell. \quad (4.19)$$

On peut vérifier (voir appendice A.6) que la représentation U_* est une application linéaire qui représente les relations de commutation, $[U_*(M), U_*(N)] = U_*([M, N])$. Dans ce cas, nous avons

$$\boxed{[L_i, L_j] = i\hbar \sum_{\ell} \epsilon_{ij\ell} L_\ell.} \quad (4.20)$$

Dans notre exemple, ce fait général se vérifie aussi directement avec (4.16). (Exercice!) En comparant (4.20) avec (4.12), qui est représenté dans le crochet de Poisson en mécanique classique, on voit que notre analogie entre le crochet de Poisson en mécanique classique et le commutateur en mécanique quantique est de nouveau vérifiée, voir tableau 3.1.

Si le système est invariant sous rotation, comme l'atome d'hydrogène, nous avons

$$U(R^{-1})U(t)U(R)\psi = U(t)\psi. \quad (4.21)$$

Ici $U(t) = \exp(-iHt/\hbar)$ est l'évolution temporelle du système et ψ est un état initial quelconque. C'est-à-dire nous pouvons d'abord effectuer une rotation du système des coordonnées, puis faire l'évolution temporelle et à la fin effectuer la rotation inverse. Ceci nous donne le même résultat comme l'évolution temporelle dans le système sans rotation. La dérivée par rapport au temps de cette équation à $t = 0$ donne

$$U(R^{-1})HU(R) = H. \quad (4.22)$$

Nous posons alors $R = R(\mathbf{n}, \beta)$. La dérivée par rapport à β à $\beta = 0$ donne

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{L}H - H\mathbf{n} \cdot \mathbf{L} = 0. \quad (4.23)$$

Comme ceci est valable pour tout \mathbf{n} , il suit que l'opérateur de Hamilton commute avec \mathbf{L} ,

$$[H, \mathbf{L}] = 0. \quad (4.24)$$

Les opérateurs L_i sont alors des intégrales premières, c'est-à-dire que leur valeurs d'attente sont des constantes du mouvement. Il suit en particulier que l'espace propre associé à une valeur propre E de H porte une représentation de $SO(3)$. On dit que les espaces propres de H 'réduisent' la représentation $U(R)$.

Le fait qu'aucun opérateur L_i ne commute avec un autre implique qu'il n'existe pas d'état pour lequel on peut mesurer précisément deux composantes du moment cinétique. C'est-à-dire qu'ils n'existe pas d'état qui soit un vecteur propre de deux composantes différentes de \mathbf{L} simultanément. Par contre, il est facile de montrer que (exercice !)

$$[L_i, L^2] = 0, \quad L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2. \quad (4.25)$$

On peut donc trouver des états qui sont des vecteurs propres de L^2 et d'une des composantes L_i .

Exercice : montrez que les harmoniques sphériques, $Y_{\ell m}$, sont des vecteurs propres de L^2 avec valeur propre $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$, c'est-à-dire

$$L^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell m} \quad (4.26)$$

et de L_3 avec valeur propre $\hbar m$, c'est-à-dire

$$L_3 Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m}. \quad (4.27)$$

4.2 Le groupe de rotation en mécanique quantique

Dans cette section un peu mathématique, nous argumentons que en général les symétries en mécanique quantique sont représentées par des représentation du 'revêtement universel' du groupe de symétrie et nous introduisons cette notion. Nous ne procédons pas de façon mathématiquement rigoureuse et nous ne démontrons pas les théorèmes utilisés. Une bonne référence pour cela est [13].

Nous discutons le groupe de rotation et sa représentation en mécanique quantique pour un espace de Hilbert \mathcal{H} quelconque. Nous rappelons qu'un état en mécanique quantique est une raie unitaire, $[\psi] = \{e^{i\alpha}\psi \mid \psi \in \mathcal{H}\}$. Ici \mathcal{H} ne doit pas nécessairement être de la forme $L^2(\mathbb{R}^{3N})$. Les particules pourraient aussi avoir de la structure interne et, par exemple, être représentées par des vecteurs qui se transforment aussi sous rotations.

Nous attendons donc qu'une représentation des rotations soit de la forme

$$\begin{aligned} SO(3) &\rightarrow \{\text{opérateurs unitaires ou anti-unitaires sur } \mathcal{H}\} : \\ R &\mapsto U(R) \end{aligned} \quad (4.28)$$

avec

$$U(R_1)U(R_2) = \exp[i\alpha(R_1, R_2)]U(R_1 R_2), \quad \alpha(R_1, R_2) \in \mathbb{R}. \quad (4.29)$$

Le pré-facteur $\exp[i\alpha(R_1, R_2)]$ est dû au fait que les symétries sont représentées par des automorphismes de Wigner, voir éq. (3.46). Nous considérons le sous-groupe $R(\mathbf{n}, \beta)$ des rotations avec un angle β autour une direction \mathbf{n} donnée, elles forment un groupe additif à un paramètre, $R(\mathbf{n}, \beta_1)R(\mathbf{n}, \beta_2) = R(\mathbf{n}, \beta_1 + \beta_2)$. D'après le théorème 3.3, $U(R(\mathbf{n}, \beta))$ est unitaire (et non anti-unitaire). Comme toute rotation est de la forme $R(\mathbf{n}, \beta)$ pour une direction \mathbf{n} et un angle β ceci implique que

tous les opérateurs $U(R)$ sont unitaires.

Une application d'un groupe dans les opérateurs unitaires sur une espace de Hilbert avec la propriété (4.29) est appelée une 'représentations projective' du groupe.

La question est alors, est-ce qu'on peut trouver une façon de choisir la phase de $U'(R) = \exp[i\gamma(R)]U(R)$, $\gamma(R) \in \mathbb{R}$ telle que $R \mapsto U'(R)$ devient une représentation 'ordinaire' qui satisfait à (4.29) avec $\alpha(R_1, R_2) \equiv 0 \forall R_1, R_2 \in SO(3)$.

La réponse à cette question est en général NON.

Théorème : *Une représentation projective d'un groupe G peut toujours être transformée en une représentation ordinaire si et seulement si le groupe considéré est simplement connexe¹.*

La notion de simplement connexe est une notion topologique qui veut dire que tout chemin fermé peut être contracté en un point par une déformation continue, voir fig. 4.1. Un chemin fermé est une application continue, $\gamma : [0, 1] \rightarrow G$ avec $\gamma(0) = \gamma(1)$. En d'autres termes plus intuitifs : un espace simplement connexe n'a pas de "trou".

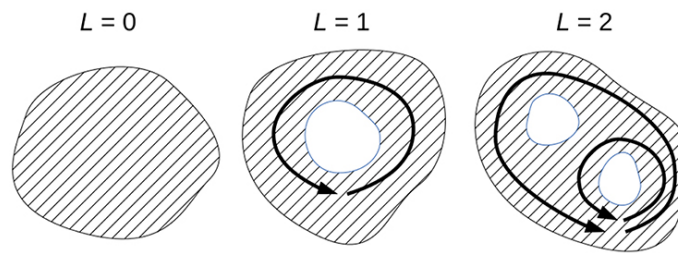


FIGURE 4.1 – Un espace simplement connexe (à gauche), et deux espace non simplement connexe (au milieu avec genus 1 et à droit avec genus 2).

Des autres exemples sont les sphères. \mathbb{S}^1 n'est pas simplement connexe tandis que tous les autres sphères, \mathbb{S}^n avec $n > 1$ le sont. Un groupe G de matrices

1. La preuve de ce théorème n'est pas simple. On la trouve dans [13].

(plus généralement un groupe topologique) est appelé 'connexe' si pour tous $g_1, g_2 \in G$ il existe un chemin $\gamma : [0, 1] \rightarrow G$ avec $\gamma(0) = g_1$ et $\gamma(1) = g_2$.

Exemples : $SO(3)$ est connexe mais $O(3)$ ne l'est pas. Il n'y a pas de chemin dans $O(3)$ qui passe d'une matrice avec déterminant 1 à une matrice avec déterminant -1 sans quitter $O(3)$ qui ne contient que des matrices avec déterminant ± 1 . L'ensemble $O(3)$ contient donc deux parties déconnectées, les matrices avec déterminant 1 (qui forment $SO(3)$) et celles avec déterminant -1 . Par contre, tout élément de $SO(3)$ est une rotation d'angle β autour une direction \mathbf{n} . Une rotation $R(\mathbf{n}_1, \beta_1)$ peut être apportée sur $R(\mathbf{n}_2, \beta_2)$ en d'abord tournant de façon continue \mathbf{n}_1 en \mathbf{n}_2 et puis changeant (aussi de façon continue) β_1 en β_2 .

Il y a un théorème mathématique intéressant et utile pour nous :

Pour tout groupe de Lie, G , il existe un unique groupe de Lie simplement connexe, \tilde{G} , et un homomorphisme de groupe π ,

$$\pi : \tilde{G} \rightarrow G : \tilde{g} \mapsto \pi(\tilde{g}) \quad \text{avec} \quad \pi(\tilde{g}_1)\pi(\tilde{g}_2) = \pi(\tilde{g}_1\tilde{g}_2), \quad (4.30)$$

qui est surjectif et localement (c'est-à-dire dans un voisinage de l'identité) bijectif.

L'homomorphisme π est appelé la projection de \tilde{G} dans G . Le groupe \tilde{G} est appelé le 'revêtement universel' de G .

Exemple : $U(1)$ n'est pas simplement connexe, mais \mathbb{R} l'est. En effet,

$$\pi : \mathbb{R} \rightarrow U(1) : \varphi \mapsto e^{i\varphi} \quad (4.31)$$

est la projection du revêtement universel qui est $(\mathbb{R}, +)$ dans $U(1)$. Ici le noyau est $\pi^{-1}(1) = \mathbb{Z} \cdot 2\pi$.

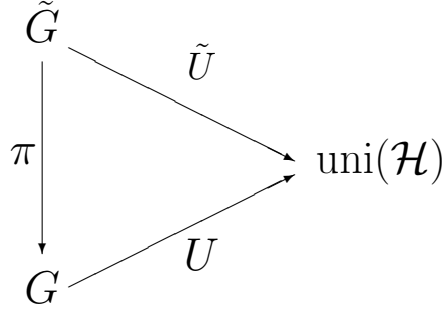
Si nous avons alors une représentation projective de G dans les opérateurs unitaires de \mathcal{H} , nous pouvons définir une représentation projective de \tilde{G} par $\tilde{U}(\tilde{g}) = U(\pi(\tilde{g}))$. Comme \tilde{G} est simplement connexe, d'après le théorème mentionné au début (que nous ne démontrons pas ici) nous pouvons alors choisir les phases telles que \tilde{U} est une représentation ordinaire.

Nous avons donc le résultat suivant :

Pour toute représentation projective d'un groupe de Lie (semi-simple) G il existe un choix des phases tel que $\tilde{U}(\tilde{g}) = U(\pi(\tilde{g}))$ est une représentation (ordinaire) de son revêtement universel \tilde{G} .

En mécanique quantique, les représentations des groupes de symétries sur les états correspondent donc à des représentations unitaires du revêtement universel et non du groupe de symétrie lui-même.

Nous avons donc le diagramme commutatif suivant



Ici U est une représentation projective tandis que \tilde{U} est une représentation ordinaire.

Comme π est bijective sur un voisinage de $\mathbb{1} \in \tilde{G}$, son noyau est un sous-groupe discret. Il est dénombrable ou fini.

En plus, comme une dérivée $M = d\exp(tM)/dt|_{t=0}$ de dépend que d'un voisinage de l'identité, les algèbres de Lie de G et de son revêtement universel, \tilde{G} , sont isomorphes.

4.3 Le groupe $SU(2)$ comme revêtement universel de $SO(3)$

Dans ce paragraphe nous voulons démontrer que le revêtement universel de $SO(3)$ est le groupe $SU(2)$. Pour ce faire, nous trouverons d'abord la projection $\pi : SU(2) \rightarrow SO(3)$ et après nous démontrons que $SU(2)$ est isomorphe à la 3-sphère \mathbb{S}^3 , et donc simplement connexe.

Pour $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ nous introduisons la matrice

$$\tilde{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & -x_3 \end{pmatrix} = \sum_j x_j \sigma_j \quad \text{avec} \quad (4.32)$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.33)$$

Les matrices σ_i s'appellent les **matrices de Pauli** (d'après Wolfgang Pauli). Ces matrices sont très importantes en mécanique quantique surtout pour l'étude des particules de spin 1/2, par exemple. l'électron, comme nous le verrons. Comme exercice on vérifie les relations de commutation

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i \sum_{\ell} \epsilon_{j k \ell} \sigma_{\ell}. \quad (4.34)$$

Des autres identités utiles sont

$$\boxed{(\sigma_j)^2 = \mathbb{I} \quad \text{et} \quad \text{tr}(\sigma_i \sigma_j) = 2\delta_{ij}.} \quad (4.35)$$

On vérifie aussi facilement que $\det \tilde{\mathbf{x}} = -|\mathbf{x}|^2$. De plus, $\tilde{\mathbf{x}}$ est hermitienne : $(\tilde{\mathbf{x}})^* = \tilde{\mathbf{x}}$, et $\text{tr}(\tilde{\mathbf{x}}) = 0$. D'autre part, toute matrice X 2×2 , hermitienne sans trace est de la forme $\tilde{\mathbf{x}}$ pour certains coefficients \tilde{x}_j . Soit alors $U \in SU(2)$, nous définissons

$$X' = U\tilde{\mathbf{x}}U^*. \quad \text{Il est évident que} \quad (4.36)$$

$$(X')^* = X' \quad \text{et} \quad \text{tr}(X') = \text{tr}(U\tilde{\mathbf{x}}U^*) = \text{tr}(\tilde{\mathbf{x}}) = 0, \quad (4.37)$$

et donc il existe un vecteur $\mathbf{x}' \in \mathbb{R}^3$ tel que $X' = \tilde{\mathbf{x}}' = U\tilde{\mathbf{x}}U^*$ comme $\det(U\tilde{\mathbf{x}}U^*) = \det \tilde{\mathbf{x}}$ il suit que $|\mathbf{x}|^2 = |\mathbf{x}'|^2$. L'application $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}'$ définit une application linéaire $R(U)$ de \mathbb{R}^3 dans lui même qui conserve les normes, donc $R(U) \in O(3)$. Cependant, comme toute matrice $U \in SU(2)$ peut être transformé en \mathbb{I} de façon continue, ceci doit aussi être le cas pour $R(U)$ qui dépend de façon continue des coefficients U_{ij} . Nous avons même $R(U) \in SO(3)$. La rotation $R(U)$ est définie par

$$\widetilde{R(U)\mathbf{x}} = U\tilde{\mathbf{x}}U^*. \quad (4.38)$$

Cette application applique chaque élément $U \in SU(2)$ à un élément $R(U) \in SO(3)$. De plus pour $U, V \in SU(2)$ nous trouvons

$$\widetilde{R(V)R(U)\mathbf{x}} = VU\tilde{\mathbf{x}}U^*V^* = (VU)\tilde{\mathbf{x}}(VU)^* = \widetilde{R(VU)\mathbf{x}}. \quad (4.39)$$

L'application $U \mapsto R(U)$ est un donc homomorphisme de groupe. Nous voulons démontrer que cette application est notre projection $\pi : SU(2) \rightarrow SO(3)$. Pour ceci nous démontrons d'abord qu'elle est surjective. On vérifie facilement que pour

$$U_3(\varphi) = \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix}, \quad \text{alors} \quad R(U_3(\varphi)) \quad (4.40)$$

est une rotation autour de l'axe \mathbf{e}_3 avec angle φ . De même, pour les éléments suivants de $SU(2)$

$$U_2(\beta) = \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix}, \quad U_1(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) & -i\sin(\alpha/2) \\ -i\sin(\alpha/2) & \cos(\alpha/2) \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

$R(U_2(\beta))$ est une rotation d'angle β autour de l'axe \mathbf{e}_2 et $R(U_1(\alpha))$ est une rotation d'angle α autour de l'axe \mathbf{e}_1 .

Exercice : vérifier ceci en détail.

Toute rotation est d'un produit de rotations autour des axes principaux, notre homomorphisme π est donc surjectif. Pour le noyau nous avons

$$\pi^{-1}(\mathbb{I}) = \{U \in SU(2) \mid U\tilde{\mathbf{x}}U^* = \tilde{\mathbf{x}} \ \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3\}. \quad (4.42)$$

Evidemment $\pm\mathbb{I} \in \pi^{-1}(\mathbb{I})$. Nous montrons que $\pi^{-1}(\mathbb{I}) = \{\mathbb{I}, -\mathbb{I}\}$. Toute matrice 2×2 s'écrit de la forme

$$X = (\lambda + i\rho)\mathbb{I} + \tilde{\mathbf{x}} + i\tilde{\mathbf{y}}.$$

Pour $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$ et $\lambda, \rho \in \mathbb{R}$. Pour $U \in \pi^{-1}(\mathbb{I})$ il suit que $UX = XU$ pour tout $X \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$. D'après le lemme de Schur ceci implique $U = \gamma\mathbb{I}$. De plus, comme $\det U = \gamma^2 = 1$ nous avons $U = \pm\mathbb{I}$. C'est-à-dire, dans un voisinage de \mathbb{I} qui ne contient pas $-U$ pour tout élément U dans ce voisinage, π est bijectif et

$$\boxed{SO(3) \cong SU(2)/\{\mathbb{I}, -\mathbb{I}\}}. \quad (4.43)$$

Dans l'application $\pi : U \mapsto R(U)$, les matrices U et $-U$ ont alors la même image.

Nous montrons encore que le groupe $SU(2)$ est simplement connexe. Pour ceci nous trouvons une application continue et bijective de $SU(2)$ dans la sphère \mathbb{S}^3 qui est simplement connexe comme tous les sphères, \mathbb{S}^n avec $n \geq 2$.

Soit

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad a, b, c, d \in \mathbb{C} \quad (4.44)$$

une matrice unitaire à déterminant 1. Les conditions $\det U = 1$ et $U^{-1} = U^*$ impliquent que $c = -\bar{b}$ et $d = \bar{a}$ ainsi que $|a|^2 + |b|^2 = 1$, et donc

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (4.45)$$

Nous posons $a = a_1 + ia_2$, $b = b_1 + ib_2$ avec $a_j, b_j \in \mathbb{R}$. La relation (4.45) implique $a_1^2 + a_2^2 + b_1^2 + b_2^2 = 1$, c'est-à-dire $(a_1, a_2, b_1, b_2) \in \mathbb{S}^3$. L'application $U \mapsto (a_1, a_2, b_1, b_2)$ est une application continue et bijective de $SU(2)$ dans \mathbb{S}^3 et ces deux espaces sont alors homéomorphes (topologiquement équivalents). L'espace \mathbb{S}^3 est simplement connexe et donc ceci est le cas aussi pour $SU(2)$. Notez que l'identité \mathbb{I} est appliquée sur le 'pôle nord', $(1, 0, 0, 0)$ tandis que $-\mathbb{I}$ est appliquée sur le 'pôle sud', $(-1, 0, 0, 0)$. Avec ceci, $SO(3)$ est homéomorphe à la sphère \mathbb{S}^3 avec des points opposés identifiés.

2. La notion de 'simplement connexe' est préservée sous des bijection continue, c'est-à-dire des homeomorphismes.

Nous voulons aussi trouver l'isomorphisme π_* qui est induit sur les algèbres de Lie. Soit $U(s)$ un sous-groupe de $S(2)$ à 1 paramètre.

$$\pi_* : su(2) \rightarrow so(3) : \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} U(s) \mapsto \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} R(U(s)). \quad (4.46)$$

Pour trouver π_* , nous notons que les matrices

$$M_k = \frac{1}{2i} \sigma_k, \quad k \in \{1, 2, 3\} \quad (4.47)$$

forment une base de $su(2)$. Elles sont anti-hermitiennes et avec trace nulle ainsi que linéairement indépendantes. Leurs exponentiels, $U_k(s) = \exp(sM_k)$ forment donc un sous-groupe de dimension 3 de $SU(2)$, mais le seul sous-groupe de dimension 3 est $SU(2)$ lui-même. Nous avons par définition

$$M_k = \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} U_k(s), \quad (4.48)$$

et donc

$$\widetilde{\pi_*(M_k)\mathbf{x}} = \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} (U_k(s)\tilde{\mathbf{x}}U_k(-s)) = M_k\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{x}}M_k = \frac{1}{2i} \sum_j [\sigma_k, \sigma_j] x_j. \quad (4.49)$$

Avec les règles de commutation (4.34), ceci donne

$$\widetilde{\pi_*(M_k)\mathbf{x}} = \sum_{j\ell} \epsilon_{kj\ell} \sigma_\ell x_j. \quad (4.50)$$

Cependant, nous avons aussi

$$\widetilde{\pi_*(M_k)\mathbf{x}} = \sum_{j\ell} \pi_*(M_k)_{\ell j} x_j \sigma_\ell, \quad (4.51)$$

et donc

$$\boxed{\pi_*(M_k)_{\ell j} = \epsilon_{kj\ell} = \epsilon_{\ell k j} = (I_k)_{\ell j}} \quad (4.52)$$

ce qui est similaire à l'éq. (4.5) .)

Comme π_* est un isomorphisme entre algèbres de Lie, les règles de commutation pour les M_k sont donc identiques à celles des matrices I_k ce qu'on vérifie aussi directement de la définition,

$$[M_j, M_k] = \sum_\ell \epsilon_{j k \ell} M_\ell. \quad (4.53)$$

4.4 Moment cinétique et parité

Rotations

Nous considérons alors un système quantique (particule élémentaire, noyau atomique, atome, molécule etc.) qui est invariant sous rotation. Dans ce cas il existe d'après les réflexions des paragraphes 4.2 et 4.3 une représentation unitaire de $SU(2)$ sur l'espace de Hilbert \mathcal{H} dont les raies unitaires sont les états du système. Nous discuterons la parité donnée par $-\mathbb{1}_3$, après. Cette représentation

$$\mathcal{U} : SU(2) \rightarrow \text{uni}(\mathcal{H}) : A \mapsto \mathcal{U}(A) \quad (4.54)$$

indique comment les états changent sous rotation. Pour un système qui est invariant sous rotation, les transformations $\mathcal{U}(A)$ commutent avec l'évolution temporelle $U(t) = \exp(-\frac{i}{\hbar}Ht)$:

$$[\mathcal{U}(A), U(t)] = 0 \quad \forall A \in SU(2), \quad t \in \mathbb{R}. \quad (4.55)$$

La représentation \mathcal{U} de $SU(2)$ induit une représentation \mathcal{U}_* sur l'algèbre de Lie $su(2)$. D'après ce que nous avons vu, il est évident d'interpréter les opérateurs

$$\boxed{J_k := i\hbar \mathcal{U}_*(M_k)} \quad (4.56)$$

comme les moments cinétiques du système. Comme \mathcal{U}_* est une représentation entre algèbres de Lie, les J_k satisfont les mêmes règles de commutations que les M_k , à un facteur $i\hbar$ près,

$$\boxed{[J_j, J_k] = i\hbar \sum_{\ell} \epsilon_{j k \ell} J_{\ell}}. \quad (4.57)$$

Avec (4.55) on trouve aussi

$$[J_k, H] = 0, \quad k \in \{1, 2, 3\}. \quad (4.58)$$

Pour un système qui est invariant sous rotations les J_k sont des intégrales du mouvement. Ceci est une motivation additionnelle de les interpréter comme les moments cinétiques.

Les moments cinétiques J_k sont les générateurs des rotations autour de l'axe \mathbf{e}_k , dans le même sens que le Hamiltonien est le générateur de l'évolution temporelle. Le 'théorème de Stone' pour les rotation donne alors

$$\mathcal{U}(\pi^{-1}(R(\mathbf{e}_k, s))) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}J_k s\right). \quad (4.59)$$

Parité

Si le système est invariant aussi sous parité définie par

$$P : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3 : \mathbf{x} \mapsto -\mathbf{x} = P(\mathbf{x}),$$

ceci induit aussi une transformation unitaire sur l'espace de Hilbert du système, \mathcal{H} . Pourquoi une transformation anti-unitaire n'est-elle pas possible ? (Notez que P n'est pas dans la composante liée à $\mathbb{1}$ du groupe $O(3)$.) Fût $U(P)$ anti-unitaire, les états changeraient le signe de leur énergie sous parité, ce qui contredirait le fait que la parité est une symétrie qui laisse donc invariant l'énergie. Ceci se voit comme suit . Comme $U(P)$ est une symétrie,

$$[U(P), U(t)] = 0. \quad (4.60)$$

La dérivation à $t = 0$ donne

$$[U(P), iH] = 0. \quad (4.61)$$

Si $U(P)$ était anti-unitaire ceci impliquerait

$$0 = U(P)(iH\psi) - iHU(P)\psi = -i[U(P)H\psi + HU(P)\psi], \quad (4.62)$$

$$H\psi = -U^{-1}(P)HU(P)\psi. \quad (4.63)$$

Dans le deuxième signe d'égalité de (4.62) nous avons utilisé le fait que $U(P)$ est supposé anti-unitaire. Avec ceci nous obtenons

$$\langle \psi | H\psi \rangle = -\langle \psi | U^{-1}(P)HU(P)\psi \rangle = -\langle U(P)\psi | HU(P)\psi \rangle. \quad (4.64)$$

Ce qui implique que $U(P)\psi$ a une énergie qui est le négatif de l'énergie de ψ . Ce qui contredit à l'hypothèse que P est une symétrie du système.

L'opérateur $U(P)$ est donc unitaire et comme $U(P)^2$ n'est qu'une phase, nous pouvons toujours choisir $U(P)$ tel que $U(P)^2 = \mathbb{1}$. Les valeurs propres de P sont alors $\lambda_P = \pm 1$, et sont appelées la parité de l'état. L'unitarité et (4.61) impliquent

$$[U(P), H] = 0. \quad (4.65)$$

La parité est donc une intégrale du mouvement.

Systèmes composés

Nous faisons d'abord une remarque mathématique. Soit G un groupe de Lie avec algèbre de Lie \mathcal{G} . Soient ρ_1 et ρ_2 deux représentations de G (de

dimension finie) sur des espaces vectoriels E_1 et E_2 . Les représentations induites sur l'algèbre de Lie sont appelées ρ_{1*} et ρ_{2*} . Nous considérons alors la représentation $\rho_1 \otimes \rho_2$ sur le produit tensoriel $E_1 \otimes E_2$. Pour $g \in G$ et $\psi_1 \otimes \psi_2 \in E_1 \otimes E_2$, nous définissons la représentation produit par

$$(\rho_1 \otimes \rho_2)(g)(\psi_1 \otimes \psi_2) = \rho_1(g)\psi_1 \otimes \rho_2(g)\psi_2. \quad (4.66)$$

Comme un état générique de $E_1 \otimes E_2$ est une combinaison linéaire d'états de la forme $\psi_1 \otimes \psi_2$, la linéarité détermine $\rho_1 \otimes \rho_2$ sur tout $E_1 \otimes E_2$.

Nous voulons trouver la représentation $(\rho_1 \otimes \rho_2)_*$ induite de \mathcal{G} . Pour ceci nous considérons un élément $X \in \mathcal{G}$ avec $g(s) = \exp(sX) \in G$. Par définition

$$\begin{aligned} (\rho_1 \otimes \rho_2)_*(X) &= \left. \frac{d}{ds} \right|_{s=0} (\rho_1 \otimes \rho_2)(g(s)) \\ &= \left(\left. \frac{d}{ds} \right|_{s=0} (\rho_1(g(s))) \right) \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \left(\left. \frac{d}{ds} \right|_{s=0} (\rho_2(g(s))) \right) \\ &= \rho_{1*}(X) \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \rho_{2*}(X). \end{aligned} \quad (4.67)$$

Nous étudions maintenant deux systèmes S_1 et S_2 décrit par les espaces de Hilbert \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_2 qui sont couplés. L'espace de Hilbert du système couplé est $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Dans cet espace, $O(3)$ est représenté par le produit tensoriel $\mathcal{U}_1 \otimes \mathcal{U}_2$, où \mathcal{U}_1 et \mathcal{U}_2 sont les représentations de $O(3)$ dans \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_2 .

Si $\mathbf{J}^{(1)} = i\hbar \mathcal{U}_{1*}(\mathbf{M})$ et $\mathbf{J}^{(2)} = i\hbar \mathcal{U}_{2*}(\mathbf{M})$ sont les opérateurs du moment cinétique sur \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_2 , d'après (4.67) on a que

$$\mathbf{J} = i\hbar (\mathcal{U}_1 \otimes \mathcal{U}_2)_*(\mathbf{M}) = \mathbf{J}^{(1)} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{J}^{(2)} \quad (4.68)$$

est l'opérateur du moment cinétique du système couplé sur $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Souvent on supprime le facteur trivial $\mathbb{1}$ et on écrit simplement

$$\boxed{\mathbf{J} = \mathbf{J}^{(1)} + \mathbf{J}^{(2)}} \quad (4.69)$$

Dans un système couplé, en général, ce n'est que le moment cinétique total \mathbf{J} qui est conservé et non $\mathbf{J}^{(1)}$ et $\mathbf{J}^{(2)}$ séparément. Le couplage peut induire un transport de moment cinétique du système S_1 à S_2 ou vice versa, d'une manière similaire à deux ressort couplés ou l'énergie mécanique peut passer de l'un à l'autre.

4.5 Les représentations irréductibles du groupe $SU(2)$

Nous voulons trouver toutes les représentations irréductibles³ de $SU(2)$. Nous utilisons la dite 'méthode infinitésimale' où nous trouvons d'abord les représentations de l'algèbre de Lie que nous pouvons 'exponentier' à une représentation du groupe. Ceci est toujours possible si le groupe est simplement connexe, ce qui est le cas pour $SU(2)$.

Soit

$$\rho_* : su(2) \rightarrow \text{hom}(E) : X \mapsto \rho_*(X) \quad (4.70)$$

une telle représentation. Nous définissons

$$su(2) = \{X \in \mathbb{C}^{2 \times 2} \mid X = -X^*, \text{tr}(X) = 0\} \quad (4.71)$$

Pour $X \in su(2)$, $(iX)^* = iX$. Comme toute matrice B s'écrit comme somme d'une matrice hermitienne plus une matrice anti-hermitienne, plus précisément

$$B = \frac{1}{2}(B + B^*) + \frac{1}{2}(B - B^*),$$

avec $(B + B^*)^* = (B + B^*)$ et $(B - B^*)^* = -(B - B^*)$, en admettant toutes les matrices αX avec $X \in su(2)$ et $\alpha \in \mathbb{C}$ nous obtenons toutes les matrices à trace nulle. Ceci est $sl(2, \mathbb{C})$, l'algèbre de Lie de $SL(2, \mathbb{C})$, le groupe des matrices 2×2 avec déterminant 1. En posant $\rho_*(\alpha X) = \alpha \rho_*(X)$ nous pouvons élargir ρ_* à une représentation de $sl(2, \mathbb{C})$. Nous posons

$$J_k = i\hbar \rho_*(M_k) = \frac{\hbar}{2} \rho_*(\sigma_k). \quad (4.72)$$

Avec les relations de commutation des matrices σ_j , voir (4.34) (ou avec les règles de commutation des M_k), nous obtenons

$$\boxed{[J_j, J_k] = i\hbar \sum_{\ell} \epsilon_{j k \ell} J_{\ell}.} \quad (4.73)$$

Nous introduisons alors les opérateurs

$$\boxed{J_{\pm} := J_1 \pm iJ_2.} \quad (4.74)$$

3. Une représentation ρ d'un groupe G est appelée 'irréductible' sur un espace vectoriel E (de dimension fini) si les seuls sous-espaces de E qui sont invariants sous tous l'ensemble de transformations linéaires $\Delta = \{\rho(g) \mid g \in G\}$ sont E et $\{0\}$. L'espace E n'a donc pas de sous-espace invariant non-trivial (et ne peut pas être 'diagonalisé par bloc').

Comme on vérifie facilement, ils obéissent les relations de commutation suivantes avec J_3

$$\boxed{[J_3, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm.} \quad (4.75)$$

Soit alors $\psi_m \in E$ un vecteur propre de J_3 avec valeur propre $m\hbar$,

$$\boxed{J_3\psi_m = m\hbar\psi_m.} \quad (4.76)$$

Nous choisissons le facteur \hbar pour que m soit adimensionnel. L'opérateur J_3 est hermitien et donc $m \in \mathbb{R}$. Si $J_\pm\psi_m \neq 0$, ceci est un vecteur propre de J_3 avec valeur propre $(m \pm 1)\hbar$. Cela se voit comme suit :

$$J_3(J_\pm\psi_m) = [J_3, J_\pm]\psi_m + J_\pm m\hbar\psi_m = (m \pm 1)\hbar J_\pm\psi_m. \quad (4.77)$$

Nous notons aussi que J_- est l'adjoint (l'hermitien conjugué) de J_+ donc

$$\langle \psi | J_+ J_- \psi \rangle = \langle J_- \psi | J_- \psi \rangle \geq 0. \quad (4.78)$$

Nous choisissons alors ψ_j le vecteur propre de J_3 avec la plus grande valeur propre $j\hbar$. L'éq. (4.77) implique que

$$J_+\psi_j = 0 = J_- J_+\psi_j. \quad (4.79)$$

Nous avons aussi

$$J_- J_+ = (J_1 - iJ_2)(J_1 + iJ_2) = J_1^2 + J_2^2 + i(J_1 J_2 - J_2 J_1) = \mathbf{J}^2 - J_3^2 - \hbar J_3, \quad (4.80)$$

et de la même façon nous trouvons

$$J_+ J_- = \mathbf{J}^2 - J_3^2 + \hbar J_3. \quad (4.81)$$

Pour ψ_j l'éq. (4.80) implique $0 = (\mathbf{J}^2 - J_3^2 - \hbar J_3)\psi_j$, donc

$$\mathbf{J}^2\psi_j = (J_3^2 + \hbar J_3)\psi_j = j(j+1)\hbar^2\psi_j. \quad (4.82)$$

Nous définissons alors ψ_m de façon récursive par

$$\boxed{J_- \psi_m = \tau_m \psi_{m-1},} \quad m = j, j-1, \dots \quad (4.83)$$

où nous choisissons τ_m tel que les ψ_{m-1} sont normalisés (sauf si $\psi_{m-1} = 0$). Comme les ψ_m ont des valeurs propres différentes sous un opérateur hermitien ils sont tous orthogonaux. De plus,

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}^2, J_k] &= \sum_\ell [J_\ell^2, J_k] = \sum_\ell (J_\ell [J_\ell, J_k] + [J_\ell, J_k] J_\ell) \\ &= i\hbar \sum_{\ell, j} \epsilon_{\ell k j} (J_\ell J_j + J_j J_\ell) = 0. \end{aligned} \quad (4.84)$$

Le dernier signe d'égalité suit parce que $\epsilon_{\ell k j}$ est anti-symétrique en ℓ et j tandis que $(J_\ell J_j + J_j J_\ell)$ est symétrique. Comme \mathbf{J}^2 commute avec tous les J_k et donc aussi avec J_\pm il suit

$$\boxed{\mathbf{J}^2 \psi_m = j(j+1) \hbar^2 \psi_m.} \quad (4.85)$$

Comme notre représentation a une dimension finie et tous les ψ_m sont orthogonaux, il doit exister un $m_0 \leq j$ avec $\psi_{m_0} \neq 0$ et

$$J_- \psi_{m_0} = 0. \quad (4.86)$$

Avec (4.81), il suit que

$$0 = J_+ J_- \psi_{m_0} = (\mathbf{J}^2 - J_3^2 + \hbar J_3) \psi_{m_0} = (j(j+1) - m_0^2 + m_0) \hbar^2 \psi_{m_0}.$$

Comme $m_0 \leq j$ ceci implique $m_0 = -j$.

L'opérateur J_- qui baisse la valeur propre de J_3/\hbar de 1, arrive à $m_0 = -j$ après un nombre fini, disons $N \in \mathbb{N}_0$, pas. Par conséquent, on a

$$j - N = -j, \quad 2j = N \in \mathbb{N}_0.$$

La valeur de $j \geq 0$ est donc soit entier soit demi-entier, c'est-à-dire

$$j \in \left\{ 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \right\}. \quad (4.87)$$

L'espace linéaire engendré par les $\{\psi_m \mid m \in \{-j, -j+1, -j+2, \dots, j\}\}$ est alors de dimension $2j+1$ et il est clairement irréductible (avec J_\pm je peux atteindre tous les vecteurs de la base $(\psi_m)_{m=-j}^j$), c'est donc E .

Nous voulons encore calculer les constantes de normalisation τ_m . Supposons ψ_m normalisé, et donc

$$\begin{aligned} |\tau_m|^2 &= \|J_- \psi_m\|^2 = \langle \psi_m | J_+ J_- \psi_m \rangle = \hbar^2 \langle \psi_m | (j(j+1) - m^2 + m) \psi_m \rangle \\ &= \hbar^2 (j(j+1) - m^2 + m). \end{aligned} \quad (4.88)$$

Le choix de la phase est arbitraire et nous pouvons poser

$$\tau_m = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)}. \quad (4.89)$$

(Comme τ_m dépend aussi de j on écrit souvent aussi τ_{jm} .) Avec ceci (4.83) devient

$$\boxed{J_- \psi_m = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \psi_{m-1}, \quad m = j, j-1, \dots, -j.} \quad (4.90)$$

Comme $J_+ = J_-^*$ il suit aussi

$$\boxed{J_+ \psi_m = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \psi_{m+1}, \quad m = j, j-1, \dots, -j.} \quad (4.91)$$

Inversement, si nous considérons un espace vectoriel de dimension $2j+1$ avec une base orthonormée $(\psi_m)_{m=-j}^j$ et nous définissons les opérateurs J_k avec (4.76), (4.90) et (4.91), ils satisfont aux bonnes relations de commutation (4.73) et forment alors une représentation irréductible de $su(2)$.

Par la construction générale, il est aussi clair que nous obtenons toutes les représentations irréductibles de dimension finie de cette façon. De plus, comme $SU(2)$ est un groupe compact, toutes ces représentations irréductibles sont de dimension finie, voir appendice A.6.

La représentation irréductible de $SU(2)$ avec dimension $2j+1$ est appelée D^j .

Exemples .

- $\boxed{j = 0}$:

Ceci impose que $J_k \psi_0 = 0$ ce qui implique $\exp(-iJ_k/\hbar) = \mathbb{I}$. Ceci est la représentation

$$SU(2) \rightarrow \text{aut}(E) : A \mapsto D^0(A) = \mathbb{I}.$$

Cette représentation (triviale) est irréductible seulement si $\dim E = 1$. Si nous négligeons le mouvement orbital, ceci est la représentation d'une particule de spin zéro, une particule scalaire comme le Higgs.

- $\boxed{j = 1/2}$:

Dans ce cas

$$J_3 \psi_{1/2} = \frac{\hbar}{2} \psi_{1/2} \quad \text{et} \quad J_3 \psi_{-1/2} = -\frac{\hbar}{2} \psi_{-1/2}.$$

Nous choisissons la base orthonormée

$$\psi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Avec ceci nous trouvons

$$\boxed{J_3 = \frac{\hbar}{2} \sigma_3, \quad J_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (\sigma_1 - i\sigma_2),} \quad (4.92)$$

$$\boxed{J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (\sigma_1 + i\sigma_2).} \quad (4.93)$$

C'est-à-dire $\rho_*(\boldsymbol{\sigma}) = \boldsymbol{\sigma}$. Cette représentation est simplement l'identité,

$$SU(2) \rightarrow \text{aut}(E) : A \mapsto D^{1/2}(A) = A.$$

La représentation $D^{1/2}$ est aussi appelée la représentation spinorielle de $SO(3)$.

Si nous négligeons le mouvement orbital, ceci est la représentation d'une particule de spin 1/2 comme un électron, un proton, un neutron ou encore un quark.

- $\boxed{j = 1}$:

Il nous faut alors trois matrices J_ℓ , 3×3 qui satisfont aux relations de commutation

$$[J_m, J_n] = i\hbar \sum_k \epsilon_{mnk} J_k.$$

Les matrices I_k définies dans (4.6) satisfont cette relation sans le facteur $i\hbar$. Nous pouvons donc choisir

$$J_k = \hbar \rho_*(\sigma_k/2) = i\hbar I_k, \quad \rho_*(-i\sigma_k/2) = I_k. \quad (4.94)$$

Comme il n'existe qu'une représentation irréductibles de $SU(2)$ de dimension trois, tout autre choix doit être équivalent. Nous cherchons alors une base orthonormée qui satisfait

$$J_3\psi_1 = \hbar\psi_1, \quad J_3\psi_0 = 0 \quad \text{et} \quad J_3\psi_{-1} = -\hbar\psi_{-1}. \quad (4.95)$$

Posons

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}.$$

$$J_3\psi_1 = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} -b \\ a \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Je dois alors choisir a , b et c tels que

$$i\hbar \begin{pmatrix} -b \\ a \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}.$$

C'est-à-dire, $c = 0$ et $-ib = a$ et $ia = b$. A une phase arbitraire près, on a donc

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.96)$$

Le préfacteur $1/\sqrt{2}$ est nécessaire pour obtenir un état normalisé. On peut alors trouver ψ_0 et ψ_{-1} en résolvant les équations (4.95) comme pour ψ_1 ou en appliquant J_- d'abord sur ψ_1 et après sur ψ_0 en utilisant (4.90) et

$$J_- = J_1 - iJ_2 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -i \\ -1 & i & 0 \end{pmatrix}.$$

Un petit calcul donne

$$\psi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \psi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Nous comparons cette représentation avec l'application de recouvrement,

$$\pi : SU(2) \rightarrow SO(3) : U \mapsto R(U) \quad (4.97)$$

discutée dans le paragraphe 4.3. En dérivant les équations (4.40) et (4.41) on trouve que les générateurs des $U_k(\varphi)$ sont les matrices $-i\sigma_k/2$. Ceci implique que $R_*(-i\sigma_k/2) = I_k$, et $R_*(\sigma_k/2) = iI_k = \rho_*(\sigma_k/2)$. Il suit alors que notre représentation ρ pour $j = 1$ est simplement l'application de recouvrement :

$$SU(2) \rightarrow \text{aut}(E) : A \mapsto R(A) = D^1(A). \quad (4.98)$$

Si nous négligeons le mouvement orbital, ceci est la représentation d'une particule (massive) de spin 1 comme le boson Z .

Dans nos exemples nous trouvons aussi que $D^0(-\mathbb{1}) = D^1(-\mathbb{1}) = \mathbb{1}$ mais $D^{1/2}(-\mathbb{1}) = -\mathbb{1}$. Comme l'application de recouvrement applique $\pm\mathbb{1}$ sur $\mathbb{1}$, seul D^0 et D^1 sont des vraies représentations de $SO(3)$ tandis que pour $D^{1/2}$, l'identité dans $SO(3)$ peut correspondre à $\pm\mathbb{1}$ dans $SU(2)$. Comme une phase globale ne change pas l'état physique, $\psi \rightarrow -\psi$ est l'identité sur les rais unitaires, $[\psi] \rightarrow [-\psi] = [\psi]$.

Nous voulons encore démontrer que ce résultat des exemples est générique,

$$D^j(-\mathbb{1}) = \begin{cases} \mathbb{1} & \text{si } j \in \mathbb{N}_0 \\ -\mathbb{1} & \text{si } j \in \{1/2, 3/2, 5/2, \dots\}. \end{cases} \quad (4.99)$$

Pour montrer ceci nous rappelons que dans la représentation D^j dans la base $(\psi_j, \psi_{j-1}, \dots, \psi_{-j})$ le moment cinétique J_3 agit comme suit :

$$\frac{i}{\hbar} J_3 = D_*^j(i\sigma_3/2) = i \begin{pmatrix} j & & & \\ 0 & j-1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & -j \end{pmatrix}. \quad (4.100)$$

En prenant l'exponentiel de cette équation nous trouvons

$$D^j \begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ij\alpha} & & & \\ 0 & e^{i(j-1)\alpha} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{-ij\alpha} \end{pmatrix}. \quad (4.101)$$

La rotation $R\left(\begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix}\right)$ est une rotation autour de l'axe \mathbf{e}_3 d'un angle α . Si nous posons $\alpha = 2\pi$,

$$\begin{pmatrix} e^{i\pi} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi} \end{pmatrix} = -\mathbb{I} \quad (4.102)$$

et

$$\begin{aligned} D^j(-\mathbb{I}) &= D^j \begin{pmatrix} e^{i\pi} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i2j\pi} & & & \\ 0 & e^{i2(j-1)\pi} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{-i2j\pi} \end{pmatrix} \\ &= \begin{cases} \mathbb{I} & \text{si } j \in \mathbb{N}_0 \\ -\mathbb{I} & \text{si } j \in \{1/2, 3/2, 5/2, \dots\}. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.103)$$

Seulement après une rotation autour de l'axe \mathbf{e}_3 d'un angle $\alpha = 4\pi$, les valeurs de j demi-entières reproduisent le même élément de l'espace de Hilbert.

Si une particule au repos porte une représentation D^j non-triviale de $SU(2)$, on appelle ça son 'spin' et on utilise souvent la lettre \mathbf{S} au lieu de \mathbf{J} , et sa valeur est $j = s$, voir section 4.7.

4.6 La série de Clebsch-Gordan

Théorème fondamental d'addition de deux moments cinétiques

Nous considérons alors le produit tensoriel de deux espaces E_1 et E_2 qui portent les représentations irréductibles D^{j_1} et D^{j_2} de $SU(2)$ et qui ont alors les dimensions $2j_1 + 1$ et $2j_2 + 1$. Leur produit tensoriel $E_1 \otimes E_2$ porte la représentation $D^{j_1} \otimes D^{j_2}$ de $SU(2)$. En général cette représentation n'est pas irréductible. Nous voulons la décomposer dans ses parties irréductibles. Nous allons trouver le résultat suivant :

$$D^{j_1} \otimes D^{j_2} = \bigoplus_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^J. \quad (4.104)$$

En d'autres termes, si j_1 et j_2 sont les deux non-nul, la représentation $D^{j_1} \otimes D^{j_2}$ n'est pas irréductible, et elle contient toute représentation passant de $|j_1 - j_2|$ à $j_1 + j_2$ en pas de 1 exactement une fois.

Preuve : Pour dériver ce résultat nous considérons les bases

$$\left(\psi_{j_1, m_1} \equiv |j_1, m_1\rangle \right)_{m_1=-j_1}^{j_1} \quad \text{et} \quad \left(\psi_{j_2, m_2} \equiv |j_2, m_2\rangle \right)_{m_2=-j_2}^{j_2}$$

de E_1 et E_2 . Les vecteurs $(|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \equiv |j_1 j_2, m_1 m_2\rangle)_{(m_1, m_2)=(-j_1, -j_2)}^{(j_1, j_2)}$ forment alors une base de $E_1 \otimes E_2$. Nous savons que

$$(D^{j_1} \otimes D^{j_2})_* = D_*^{j_1} \otimes \mathbb{1} \oplus \mathbb{1} \otimes D_*^{j_2}. \quad (4.105)$$

Les vecteurs $|j_1 j_2, m_1 m_2\rangle$ dans $E_1 \otimes E_2$ sont donc des vecteurs propres de J_3 avec valeur propre

$$J_3 |j_1 j_2, m_1 m_2\rangle = \hbar M |j_1 j_2, m_1 m_2\rangle \quad (4.106)$$

$$M = m_1 + m_2. \quad (4.107)$$

L'élément avec la plus grande valeur propre de

$$J_3 = \frac{\hbar}{2} (D^{j_1} \otimes D^{j_2})_*(\sigma_3)$$

est $|j_1 j_2, j_1 j_2\rangle$ qui a $M = j_1 + j_2$,

$$J_3 |j_1 j_2, j_1 j_2\rangle = \hbar(j_1 + j_2) |j_1 j_2, j_1 j_2\rangle. \quad (4.108)$$

$D^{j_1} \otimes D^{j_2}$ contient donc la représentation $D^{j_1+j_2}$. Cette représentation n'est contenue qu'une fois car nous n'avons qu'un état avec $J_3 \phi = \hbar(j_1 + j_2)\phi$.

Nous supposons, sans perte de généralité, que $j_1 \geq j_2$. Soit $N(J)$ le nombre de fois que la représentation D^J apparaît dans $D^{j_1} \otimes D^{j_2}$. Les valeurs de M y correspondant sont $-J, -J+1, \dots, J$. Le nombre d'états avec $m_1 + m_2 = M$ est alors

$$n(M) = \sum_{J \geq |M|} N(J). \quad (4.109)$$

Par conséquent

$$N(J) = n(J) - n(J+1). \quad (4.110)$$

Cependant, $n(M)$ est simplement le nombre de couples (m_1, m_2) avec somme $m_1 + m_2 = M$. Ceci est le nombre de points situé sur l'anti-diagonale avec

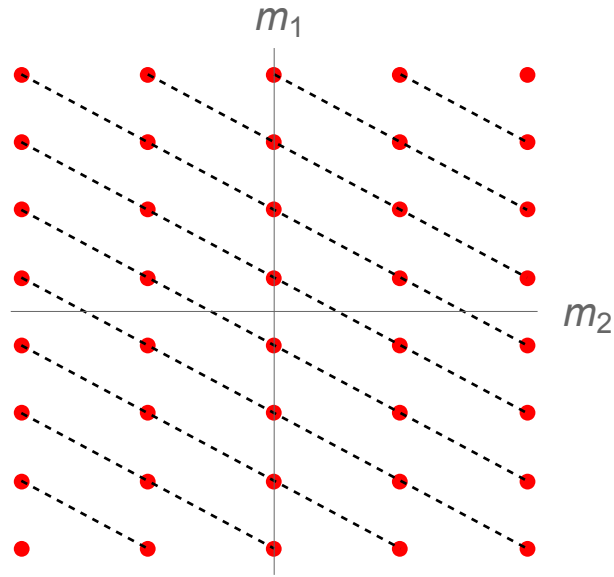


FIGURE 4.2 – Le nombre de couples (m_1, m_2) pour un $M = m_1 + m_2$ fixé pour le cas $j_1 = 7/2$ (vertical) et $j_2 = 2$ (horizontal) est le nombre de points sur l’anti-diagonale correspondante.

$x + y = M$ à l’intérieur du rectangle formé par $(-j_2, j_2)$ et $(-j_1, j_1)$, voir fig. 4.2. On trouve les nombres suivants de points sur les anti-diagonales

$$n(M) = \begin{cases} 0 & \text{si } |M| > j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 + 1 - |M| & \text{si } j_1 + j_2 \geq |M| \geq j_1 - j_2 \\ 2j_2 + 1 & \text{si } j_1 - j_2 \geq |M|. \end{cases} \quad (4.111)$$

Substituant ce résultat dans (4.110)

$$N(J) = \begin{cases} 1 & \text{si } j_1 + j_2 \geq J \geq j_1 - j_2 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.112)$$

Ceci complète la preuve. □

Le résultat (4.104) est aussi en accord avec les dimensions des représentations.

Exercice Montrer l’égalité $\stackrel{!}{=}$ dans la série d’équations suivantes :

$$\dim(D^{j_1} \otimes D^{j_2}) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \stackrel{!}{=} \sum_{J=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2J + 1) = \dim \left(\bigoplus_{J=j_1-j_2}^{j_1+j_2} D^J \right). \quad (4.113)$$

Une preuve plus élégante avec la notion des caractères, qui peut être généralisée aussi à d'autres groupes se trouve dans [14].

Vecteurs propres du moment cinétique total. Coefficients de Clebsch-Gordan

Les vecteurs $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$ ainsi que les $|J, M\rangle$ forment deux bases orthonormées de $E_1 \otimes E_2$. Elles sont liées par une transformation unitaire,

$$\boxed{|J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1 j_2, m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | J, M\rangle .} \quad (4.114)$$

Les éléments de la matrice unitaire, les $\langle j_1 j_2, m_1 m_2 | J, M\rangle$ sont appelés les 'coefficients de Clebsch-Gordan'⁴. Pour les définir de façon précise nous devons encore fixer les phases des $|JM\rangle$ qui jusqu'ici sont arbitraires. Pour un J donné nous fixons les phases relatives en demandant les relations (4.90). Avec ceci les $|JM\rangle$ sont fixés à une phase près pour chaque J . Nous fixons cette ambiguïté en demandant que la composante de $|j_1 j_2, j_1 J - j_1\rangle$ de $|J, J\rangle$ soit réelle et non négative. Ceci implique que aussi

$$\langle j_1 j_2, j_1 J - j_1 | J, J\rangle \in \mathbb{R}_+ . \quad (4.115)$$

Un grand nombre des propriétés des coefficients de Clebsch-Gordan suivent directement de leur définition. D'après le théorème d'addition, pour que $\langle j_1 j_2, m_1 m_2 | J, M\rangle \neq 0$ il faut que

$$M = m_1 + m_2 \quad \text{et} \quad j_1 + j_2 \geq J \geq |j_1 - j_2| . \quad (4.116)$$

Pour obtenir $\langle j_1 j_2, m_1 m_2 | J, M - 1\rangle$ de $\langle j_1 j_2, m_1 m_2 | J, M\rangle$ on peut appliquer l'opérateur

$$J_- = J_-^{(1)} + J_-^{(2)} . \quad (4.117)$$

Les coefficients qui interviennent sont τ_{JM} , $\tau_{j_1 m_1}$ et $\tau_{j_2 m_2}$ qui sont tous réelles, voir éq. (4.89). Comme on peut obtenir tous les coefficients de Clebsch-Gordan de cette manière, on peut donc conclure qu'ils sont tous réels. La matrice unitaire ($\langle j_1 j_2, m_1 m_2 | J, M\rangle$) est alors une matrice orthogonale. Les

4. Souvent on trouve la notations $\langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j_1 j_2 J, M\rangle$ dans la littérature. Par souci de clarté, et car ce n'est pas ambigu, pour utilisons simplement $\langle j_1 j_2, m_1 m_2 | J, M\rangle$.

relations d'orthogonalité sont

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | J, M \rangle \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | J', M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}, \quad (4.118)$$

$$\sum_{JM} \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | J, M \rangle \langle j_1 j_2, m'_1 m'_2 | J, M \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}. \quad (4.119)$$

De plus, avec (4.108) nous concluons que

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1 j_2, j_1 j_2\rangle \text{ donc } \langle j_1 j_1, j_2 j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 \rangle = 1. \quad (4.120)$$

Par application répétée de $J_- = J_-^{(1)} + J_-^{(2)}$ à cette équation on construit tous les vecteurs $|J, M\rangle$ pour $J = j_1 + j_2$. Après on construit $|J, J\rangle$ pour $J = j_1 + j_2 - 1$ en utilisant que ce vecteur doit être orthogonal à $|J, M\rangle = |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$ et on continue avec l'application de J_- , et ainsi de suite. Tous les coefficients de Clebsch-Gordan se trouvent aussi avec *Mathematica*.

A titre d'exemple nous additionnons deux spins $1/2 = j_1 = j_2$. Les résultats finaux possibles sont $J = 1$ et $J = 0$. En appliquant J_- à

$$|++\rangle \equiv |1/2 1/2, 1/2 1/2\rangle$$

nous trouvons

M	$J = 1$	$J = 0$	
1	$ 1, 1\rangle = ++\rangle$		
0	$ 1, 0\rangle = \frac{ +-\rangle + -+\rangle}{\sqrt{2}}$	$ 0, 0\rangle = \frac{ +-\rangle - -+\rangle}{\sqrt{2}}$	(4.121)
-1	$ 1, -1\rangle = --\rangle$		

Dès que les moments cinétiques sont plus élevés, il faut recourir à des méthodes plus élaborées. On peut établir diverses relations de récurrence. Par exemple

$$\begin{aligned} \sqrt{J(J+1) - M(M+1)} \langle j_1 j_1, m_1 m_2 | J, M+1 \rangle = \\ \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)} \langle j_1 j_1, m_1 - 1 m_2 | J, M \rangle + \\ \sqrt{j_1(j_1+1) - m_2(m_2-1)} \langle j_1 j_1, m_1 m_2 - 1 | J, M \rangle, \end{aligned} \quad (4.122)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{J(J+1) - M(M-1)} \langle j_1 j_1, m_1 m_2 | J, M-1 \rangle = \\ \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)} \langle j_1 j_1, m_1 + 1 m_2 | J, M \rangle + \\ \sqrt{j_1(j_1+1) - m_2(m_2+1)} \langle j_1 j_1, m_1 m_2 + 1 | J, M \rangle. \end{aligned} \quad (4.123)$$

Au lieu des coefficients de Clebsch Gordan on travaille souvent aussi avec les symboles $3j$ de Wigner qui ont plus de symétries. Ils sont définis par

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} := \frac{(-1)^{j_1 - j_2 + M}}{\sqrt{2J+1}} \langle j_1 j_1, m_1 m_2 | J, M \rangle. \quad (4.124)$$

Pour plus de détail, voir [9], tome 2 et les exercices.

4.7 Des particules avec spin, l'équation de Pauli

Avec ce que nous avons appris, il n'est plus difficile de décrire une particule élémentaire qui a un moment cinétique interne, qu'on appelle 'spin'. Au lieu de la fonction d'onde scalaire nous considérons une fonction d'onde à plusieurs composantes,

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \psi_r(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^r \otimes L^2(\mathbb{R}^3). \quad (4.125)$$

Ceci n'est pas très nouveau, en soi. Aussi en physique classique nous ne considérons pas que des quantités scalaires mais aussi des vecteurs (champ électriques ou magnétiques), ce qui correspond à $r = 3$ ou des tenseurs (un tenseur symétrique sans trace correspond à $r = 5$). Nonobstant, ce qui est nouveau est que la représentation $S : SU(2) \rightarrow \text{uni}(\mathbb{C}^r)$ n'est pas nécessairement une représentation à valeur unique pour toute rotation R donnée, mais, dans le cas où $S = D^s$ avec un s demi-entier, $S(A) = -S(-A)$ malgré le fait que $R(A) = R(-A)$. (Pour un espace vectoriel E nous notons par $\text{uni}(E)$ les transformations unitaires de E .) Sous la rotation $R(A)$, $A \in SU(2)$, in état ψ se transforme comme

$$\psi(\mathbf{x}) \rightarrow (U(A)\psi)(\mathbf{x}) = S(A)\psi(R(A)^{-1}\mathbf{x}). \quad (4.126)$$

Le premier facteur, $S(A)$ agit sur les composantes du vecteur $\psi(\mathbf{x})$, ceci est la représentation du spin et la rotation $R(A)^{-1}\mathbf{x}$ tourne la position, ce qui donne lieu au moment cinétique orbital. En posant $V(R) : \psi(\mathbf{x}) \mapsto \psi(R^{-1}\mathbf{x})$ nous pouvons écrire

$$U : SU(2) \rightarrow \text{uni}(\mathbb{C}^r \otimes L^2(\mathbb{R}^3)) : A \mapsto S(A) \otimes V(R(A)). \quad (4.127)$$

Ici $S(A) \otimes V(R(A))$ est la représentation tensorielle où $S(A)$ agit sur \mathbb{C}^r et $V(R(A))$ agit sur $L^2(\mathbb{R}^3)$. Le moment cinétique total est alors

$$\mathbf{J} = i\hbar U_*(\mathbf{M}) = \mathbf{S} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{L} \quad (4.128)$$

où $\mathbf{L} = i\hbar V_*(\mathbf{I})$ est le moment cinétique orbital (les matrices $I_k = \pi_*(M_k)$ sont données dans l'éq. (4.6)), et $\mathbf{S} = i\hbar S_*(\mathbf{M}) = \hbar S_*(\boldsymbol{\sigma}/2)$ est le spin de la particule, son moment cinétique interne. Les composantes S_k s'appellent les opérateurs de spin. Par construction, ils satisfont aux mêmes règles de commutation que les L_k et les J_k . Pour un système qui est invariant sous

rotations nous nous attendons que \mathbf{J} soit conservé, en revanche, en général, \mathbf{L} et \mathbf{S} ne le sont pas individuellement.

Pour des particules 'élémentaires' comme l'électron, le proton ou le neutron, nous nous attendons que S soit une représentation irréductible, $S = D^s$, avec $s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$. Le chiffre s est appelé le 'spin' de la particule.

$$\boxed{\mathbf{S} = \hbar D_*^s(\boldsymbol{\sigma}/2)} . \quad (4.129)$$

Le spin de l'électron peut être trouvé par exemple par les spectres de métaux alcalins. Ceci sont des éléments avec seulement un électron dans la couche supérieure (lithium, sodium, potassium, etc.), et pour $\ell \neq 0$ leur spectres ont toujours deux lignes très proches. Pour $s = 1/2$ ceci se comprend facilement car d'après la série Clebsch-Gordan

$$D^\ell \otimes D^{1/2} = D^{\ell+1/2} \oplus D^{\ell-1/2} . \quad (4.130)$$

Le couplage entre spin et orbite scinde tout niveau d'énergie en deux niveaux légèrement différents.

Nous considérons alors la fonction d'onde d'un électron comme

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\mathbf{x}) \\ \psi_\downarrow(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix} . \quad (4.131)$$

La quantité ψ à deux composantes est appelée un *spineur* (contrairement au scalaires qui n'ont qu'une composante et aux vecteurs qui en ont trois). Un spineur est déterminé par la façon comment il se transforme sous rotations : soit $A \in SU(2)$ telle que $R = R(A)$. Alors le spineur se transforme sous la rotation R comme $\psi(\mathbf{x}) \mapsto A\psi(R^{-1}\mathbf{x})$. Comme $R = R(A)$ a deux solutions, A et $-A$, la transformation d'un spineur sous rotation n'est unique que au signe près. Il est aussi possible d'écrire $\psi(\mathbf{x}, \mu)$ avec $\mu = \pm 1/2$.

La composante 3 du spin est

$$S_3\psi = \frac{\hbar}{2}\sigma_3\psi = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ -\psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix} . \quad (4.132)$$

Nous voulons trouver l'équation de Schrödinger pour une particule avec spin dans un champ électromagnétique. Nous ne considérons que le cas important $s = 1/2$. L'équation doit être de la forme

$$i\hbar\partial_t\psi = H\psi . \quad (4.133)$$

le Hamiltonien contient la partie 'orbitale' que nous avons déjà discutée et une nouvelle partie qui concerne le spin et que nous voulons 'deviner'. Nonobstant, à la fin, c'est toujours l'expérience qui décide.

$$H = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{x}, t) \right] \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes H_s = H_o \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes H_s. \quad (4.134)$$

Dans cette écriture les facteurs triviaux sont souvent supprimés et on écrit $H = H_o + H_s$.

Nous pouvons 'deviner' H_s comme suit : pour une particule chargée nous attendons qu'un moment cinétique interne soit lié à un moment magnétique interne, $\boldsymbol{\mu}_s$. De l'électrodynamique classique nous savons que le moment cinétique \mathbf{L} d'une particule chargée induit un moment magnétique

$$\boldsymbol{\mu}_o = \frac{e}{2mc} \mathbf{L}. \quad (4.135)$$

Nous posons alors

$$\boldsymbol{\mu}_s = g \frac{e}{2mc} \mathbf{S}. \quad (4.136)$$

Pour l'instant nous laissons le facteur g (facteur de Landé ou facteur gyromagnétique) libre comme nous n'avons pas de bonne raison de le poser égal à 1 comme pour $\boldsymbol{\mu}_o$. Pour H_s , choisissons l'énergie du moment magnétique $\boldsymbol{\mu}_s$ dans un champ magnétique extérieur :

$$H_s = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} = -g \frac{e}{2mc} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = -\frac{g}{2} \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (4.137)$$

Notez que le terme correspondant pour $\boldsymbol{\mu}_o$ est contenu dans H_o : pour un champ magnétique homogène on peut choisir

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{x} \quad (\text{jauge de Coulomb } \nabla \cdot \mathbf{A} = 0).$$

Le terme proportionnel à $\mathbf{A} \cdot \nabla$ devient alors

$$\frac{ie\hbar}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla = \frac{-e}{2mc} (\mathbf{B} \times \mathbf{x}) \cdot \frac{\hbar}{i} \nabla = \frac{-e}{2mc} \left(\mathbf{x} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \right) \cdot \mathbf{B} = -\boldsymbol{\mu}_o \cdot \mathbf{B}. \quad (4.138)$$

L'analyse de l'expérience avec un électron libre sur une trajectoire rectiligne ($\mathbf{L} = 0$) dans un champ magnétique donne deux énergies différents, ce qui confirme à nouveau que $s = 1/2$ pour l'électron et l'analyse quantitative donne $g \simeq 2$. Ceci est la célèbre expérience de Zeeman.

La valeur $g = 2$ est obtenu dans la théorie relativiste de Dirac et les petites déviations sont calculé avec la théorie de l'électrodynamique quantique. Leur

excellent accord avec l'expérience (à 12 décimales!) et un des plus grand succès de cette théorie.

$$g_e - 2 = a_e = 0.001\,159\,652\,181\,643(764) \quad (\text{théorie}), \quad (4.139)$$

$$a_{e\text{exp}} = 0.001\,159\,652\,180\,73(28) \quad (\text{expérience}). \quad (4.140)$$

Pour le proton, les expériences trouvent $g_p = 5.585694713(46)$ tandis que pour le neutron $g_n = -3.82608545(90)$. Un calcul des ces valeurs à partir de la chromodynamique quantique (QCD) des quarks n'a pas encore été fait avec succès. Comme l'interaction est forte on ne peut pas appliquer des méthodes perturbatives mais le calcul demande des simulations très couteuses ('lattice QCD').

Pour l'électron, en posant $g = 2$ nous obtenons l'équation de Pauli,

$$\boxed{i\hbar\partial_t\psi = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{x}, t) - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \psi.} \quad (4.141)$$

Notez que pour l'électron $e < 0$. Comme dans le cas sans spin, nous pouvons dériver une équation de continuité,

$$\partial_t\rho + \nabla\mathcal{J}_c = 0, \quad (4.142)$$

avec

$$\rho = e\psi^*\psi = e(|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) \quad \text{et} \quad (4.143)$$

$$\mathcal{J}_c = \frac{e\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \nabla\psi^*\psi) - \frac{e^2}{mc}\psi^*\psi\mathbf{A}. \quad (4.144)$$

La quantité \mathcal{J}_c n'est que le courant de convection. La densité de magnétisation due au spin des électrons, ($g \simeq 2$) donnée par

$$M(\mathbf{x}, t) = \frac{e\hbar}{2mc}\psi^*\boldsymbol{\sigma}\psi, \quad (4.145)$$

génère, comme on le dérive dans l'électrodynamique, un courant supplémentaire donné par

$$\mathcal{J}_s = c\nabla \times \mathbf{M} = \frac{e\hbar}{2m}\nabla \times (\psi^*\boldsymbol{\sigma}\psi). \quad (4.146)$$

Ceci est la composante du courant due au spin. Le courant total qui apparait dans les équations de Maxwell est $\mathcal{J} = \mathcal{J}_c + \mathcal{J}_s$. Comme $\nabla \cdot \mathcal{J}_s = 0$, l'équation de continuité est valable aussi bien pour \mathcal{J}_c que pour \mathcal{J} .

4.8 Systèmes de spin 1/2

En raison de leur simplicité mais aussi de leur importance nous traitons en détail le cas $s = 1/2$. Cela correspond aux électrons, quarks et aussi aux protons et neutrons. Nous ne considérons que les degrés de liberté associés au spin, que nous pouvons caractériser par

$$|s, m\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \equiv |\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \chi_+, \quad (4.147)$$

$$|s, m\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_-. \quad (4.148)$$

Un état quelconque du système dans cet espace de Hilbert de dimension 2 est

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+ + b\chi_-, \quad a, b \in \mathbb{C}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (4.149)$$

La valeur d'attente du spin en direction 3 dans cet état est, $S_3 = (\hbar/2)\sigma_3$

$$(\bar{a} \bar{b})S_3 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(\bar{a} \bar{b}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(|a|^2 - |b|^2). \quad (4.150)$$

Comme $\sigma_k^2 = \mathbb{1}$ nous trouvons $S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbb{1}$. Dans tout état du système nous mesurons alors $S^2\chi = \frac{3}{4}\hbar^2\chi$. Pour les composantes 1 et 2 du spin, nous trouvons

$$S_1\chi = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} \quad (4.151)$$

$$\langle \chi | S_1 | \chi \rangle = \frac{\hbar}{2}(\bar{a}b + \bar{b}a) = \hbar \text{Re}(\bar{a}b) \quad (4.152)$$

$$S_2\chi = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -ib \\ ia \end{pmatrix} \quad (4.153)$$

$$\langle \chi | S_2 | \chi \rangle = \frac{i\hbar}{2}(-\bar{a}b + \bar{b}a) = \hbar \text{Im}(\bar{a}b) \quad (4.154)$$

$$(4.155)$$

Nous déterminons aussi

$$S_+ = S_1 + iS_2 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad S_- = S_1 - iS_2 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.156)$$

On vérifie facilement que

$$S_+\chi_- = \hbar\chi_+, \quad S_+\chi_+ = 0, \quad S_-\chi_+ = \hbar\chi_-, \quad S_-\chi_- = 0.$$

Ceci est en accord avec (4.91) et (4.90) pour notre cas avec $j = 1/2$.

Mesurer le spin

Due à sa simplicité, le système de spin $1/2$ est un bon exemple pour la discussion d'observables incompatibles, c'est-à-dire d'observables qui ne commutent pas, et qu'on ne peut donc pas mesurer simultanément, comme c'est le cas pour les différentes composantes du spin. Le principe d'incertitude (3.32) dans l'état χ avec $\langle O \rangle \equiv \langle \chi | O | \chi \rangle$ donne pour j, k, i tous différents,

$$\overline{(\Delta S_\ell)} \equiv \sqrt{\langle (S_\ell - \langle S_\ell \rangle)^2 \rangle}, \quad (4.157)$$

$$\overline{(\Delta S_j)} \cdot \overline{(\Delta S_k)} \geq \frac{1}{2} |\langle [S_j, S_k] \rangle| = \frac{\hbar}{2} |\langle S_i \rangle|. \quad (4.158)$$

Pour l'état $\chi = a\chi_+ + b\chi_-$, nous mesurons la valeur $\hbar/2$ de S_3 avec la probabilité $|a|^2$ et la valeur $-\hbar/2$ avec la probabilité $|b|^2$. Comme l'état est normalisé, $|a|^2 + |b|^2 = 1$, les deux probabilités s'ajoutent bien à 1. Si nous effectuons la mesure de S_3 , et nous mesurons, disons $+\hbar/2$, après la mesure le système est dans l'état χ_+ . Ceci est la réduction de la fonction d'onde pour cet exemple. Par contre, si nous mesurons S_1 au lieu de S_3 , le système sera après la mesure dans un état propre de S_1 .

Déterminons les valeurs propres et les vecteurs propres de S_1 : les valeurs propres de S_1 sont les solutions de

$$0 = \det(S_1 - \lambda \mathbb{I}) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \quad (4.159)$$

$$\lambda = \pm \frac{\hbar}{2}, \quad (4.160)$$

comme les valeurs propres de S_3 et aussi de S_2 comme on vérifie facilement. Les vecteurs propres, nous les dénommons $\chi_\pm^{(1)}$, sont donnés par

$$S_1\chi_+^{(1)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \chi_+^{(1)} = \frac{\hbar}{2}\chi_+^{(1)}, \quad (4.161)$$

$$\chi_+^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad (4.162)$$

$$S_1\chi_-^{(1)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \chi_-^{(1)} = -\frac{\hbar}{2}\chi_-^{(1)}, \quad (4.163)$$

$$\chi_-^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (4.164)$$

Le pré-facteur est fixé par la normalisation et la phase est choisie telle que le premier élément (non-nulle) soit positif.

Les vecteurs propres d'une matrice hermitienne peuvent être choisis orthogonaux, et ils forment alors une base orthonormale. Pour notre état χ nous trouvons

$$\chi = a\chi_+ + b\chi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(a+b)\chi_+^{(1)} + \frac{1}{\sqrt{2}}(a-b)\chi_-^{(1)}. \quad (4.165)$$

Si nous mesurons le spin en direction \mathbf{e}_1 nous trouvons donc la valeur

$$\frac{\hbar}{2} \quad \text{avec probabilité} \quad \frac{|a+b|^2}{2} \quad \text{et} \quad (4.166)$$

$$-\frac{\hbar}{2} \quad \text{avec probabilité} \quad \frac{|a-b|^2}{2}. \quad (4.167)$$

Que se passe-t-il si nous mesurons d'abord S_3 et après S_1 ? Ceci ne dépend pas du résultat de la première mesure. Si nous trouvons la valeur $\pm\hbar/2$, après la mesure le système est dans l'état χ_{\pm} . Les deux sont les états avec $a=0$ ou $b=0$. Dans les deux cas la mesure suivante de S_1 donne $\pm\hbar/2$ avec la même probabilité, c'est-à-dire $1/2$.

On trouve le même résultat pour toutes les directions : si notre système est dans n'importe quel état et nous mesurons sa composante en direction j . Après ceci la probabilité pour une mesure de S_k , $k \neq j$ avec valeur $\pm\hbar/2$ est $1/2$. Après la mesure d'une composante, les deux autres sont donc complètement aléatoires.

L'expérience Stern-Gerlach

Nous considérons un champ magnétique variable en direction 3, voir fig. 4.3. Nous ne considérons que le comportement du spin pendant que l'électron passe à travers l'appareil. Nous supposons que le champ magnétique soit confiné dans le plan $y=0$ et donné par

$$\mathbf{B}(x, z) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ (B_0 + \alpha z)\mathbf{e}_3 & 0 \leq x \leq L \\ 0 & x > L. \end{cases} \quad (4.168)$$

Nous écrivons le Hamiltonien du spin comme fonction du temps pour un électron qui traverse l'appareil dans le plan (x, z) . Nous supposons que l'électron entre au moment $t=0$ et sort au moment $t=T$. Pour le hamiltonien du spin

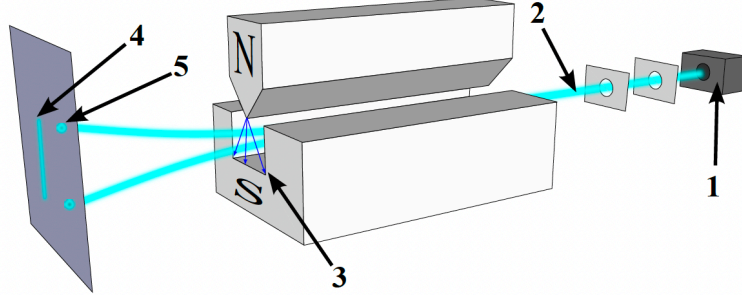


FIGURE 4.3 – Un appareil Stern-Gerlach : 1) la source des particules, 2) le faisceau en propagation, 3) le champ magnétique inhomogène, 4) un signal classique possible sur l'écran, 5) les deux taches observées sur l'écran pour des particules de spin 1/2.

(4.137), $H_s = -\boldsymbol{\mu}_s \mathbf{B}$ nous trouvons

$$H_s(t) = \begin{cases} 0 & t < 0, \\ \frac{|e|\hbar}{2mc} \sigma_3 (B_0 + \alpha z) & 0 \leq t \leq T, \\ 0 & t > T. \end{cases} \quad (4.169)$$

Nous supposons que à $t < 0$ l'électron est dans l'état

$$\chi = a\chi_+ + b\chi_-. \quad (4.170)$$

Les états χ_{\pm} sont des solution de l'équation de Schrödinger stationnaire avec des énergies

$$E_{\pm} = \pm \frac{|e|\hbar}{2mc} (B_0 + \alpha z) = \pm \gamma (B_0 + \alpha z), \quad \gamma = \frac{|e|\hbar}{2mc}. \quad (4.171)$$

L'évolution des états χ_{\pm} est donc donnée par le facteur exponentiel $\exp(-iE_{\pm}t/\hbar)$ usuel, tel que

$$\chi(t) = a\chi_+ \exp(-iE_+t/\hbar) + b\chi_- \exp(-iE_-t/\hbar), \quad t \leq T \quad (4.172)$$

$$\chi(t) = (ae^{-i\gamma B_0 T/\hbar} \chi_+) e^{-i\gamma \alpha T z/\hbar} + (be^{i\gamma B_0 T/\hbar} \chi_-) e^{i\gamma \alpha T z/\hbar}, \quad t \geq T \quad (4.173)$$

Les facteurs de la forme e^{ikz} dans l'expression finale correspondent à une impulsion non-nulle $p = \hbar k$ en direction 3,

$$p_3 = \pm \gamma \alpha T. \quad (4.174)$$

Notez que la dépendance en z du champ magnétique est impérative pour ce résultat.

Si la vitesse initiale de la particule est en direction fixée, en physique classique nous nous attendons à la même déviation pour tous les électrons et donc une tâche unique. En mécanique quantique, une particule avec spin $s = 1/2$, qui bouge, disons, avec vitesse v_1 en direction 1, va développer une impulsion en direction 3 dont le signe dépend de la valeur de S_3 de la particule. Le faisceau alors génère deux tâches sur un écran à distance d de l'appareil aux hauteurs

$$d \frac{p_3}{mv_1} = \pm d \frac{|e| \hbar \alpha T}{2m^2 c v_1}.$$

De plus, un faisceau de particules avec spin s produira $2s+1$ tâches équidistantes.

Cette expérience est souvent faite avec des atomes qui ont spin $1/2$ dans leur état fondamental, comme par exemple l'argent ou les métaux alcalins, qui n'ont qu'un électron dans la couche supérieure et qui ont donc spin $s = 1/2$. L'expérience Stern-Gerlach permet aussi de générer des faisceaux de particules dans des états propres de S_3 .

Chapitre 5

Intrication quantique, EPR et l'inégalité de Bell

5.1 Des particules identiques, des bosons et des fermions

Jusqu'ici nous avons supposé que nous pouvons distinguer les particules quand nous avons parlé des états contenant plusieurs particules. Ceci est certainement le cas s'il s'agit de particules différentes, par exemple un électron et un proton. Cependant, en physique classique ceci est aussi le cas pour des particules identiques. Je peux les numéroter et considérer le chemin que prend la particule 1 et après le chemin qu'a pris la particule 2 et ainsi de suite. C'est-à-dire, si deux particules font un trajet d'un point de départ bien connu vers mon écran sur lequel elles produisent une tache, en physique classique je peux, en principe, savoir quelle particule a fait quel tache.

En physique quantique ceci n'est pas le cas. Si nous considérons deux électrons, ils sont décrits par leur nombres quantiques fixés par leur fonction d'onde, et nous ne pouvons pas ajouter de l'information sans changer l'état du système. Aussi, si nous voulons observer la position d'un des électrons durant son trajet, nous perturbons fortement le système. Pour cette raison, en mécanique quantique il n'est pas possible de distinguer entre des particules identiques. Il semble alors naturel que toutes les configurations qui ne diffèrent que par un échange de particules soient donné par un unique état. Ceci est aussi en accord avec les expériences.

Pour comprendre ce que ça implique nous considérons deux particules identiques, la première dans l'état $|\psi\rangle$ et la deuxième dans l'état $|\phi\rangle$. Si nous

pouvons les distinguer l'état du système est $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \equiv |\psi\phi\rangle$. Cependant, si les particules sont identiques, nous ne pouvons pas distinguer entre $|\psi\phi\rangle$ et $|\phi\psi\rangle$. Nous supposons que l'état du système est une combinaison linéaire,

$$|\Psi\rangle = a|\psi\phi\rangle + b|\phi\psi\rangle. \quad (5.1)$$

Sous l'échange $\psi \leftrightarrow \phi$, l'état ne doit pas changer, donc la fonction d'onde ne change que d'une phase globale telle que

$$a|\phi\psi\rangle + b|\psi\phi\rangle = e^{i\alpha} (a|\psi\phi\rangle + b|\phi\psi\rangle). \quad (5.2)$$

Ceci implique

$$a = e^{i\alpha}b \quad \text{et} \quad b = e^{i\alpha}a \quad \text{et donc} \quad a = e^{2i\alpha}a \quad \text{et} \quad b = e^{2i\alpha}b. \quad (5.3)$$

Le facteur de phase doit donc être

$$e^{i\alpha} = \pm 1, \quad (5.4)$$

ce qui donne les possibilités $a = \pm b$. Il y a donc deux choix possibles pour les états : **symétrique**

$$|\Psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi\phi\rangle + |\phi\psi\rangle), \quad \text{et} \quad (5.5)$$

anti-symétrique

$$|\Psi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi\phi\rangle - |\phi\psi\rangle). \quad (5.6)$$

Le pré-facteur a été choisi tel que $|\Psi\rangle$ est bien normalisé (nous supposons que $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ soient normalisés).

Du point de vue physique, les deux possibilités sont acceptables. Cependant, si l'espace de Hilbert du système combiné contient des états symétriques et anti-symétriques, il doit aussi contenir leur combinaison linéaire qui n'est ni symétrique ni anti-symétrique. L'espace de Hilbert, qui décrit deux particules identiques, doit donc contenir soit les états symétriques soit les états anti-symétriques, mais pas les deux. Il est un fait expérimental que les particules identiques de spin entier (bosons) ont des fonctions d'onde symétriques tandis que les particules identiques de spin demi-entier (fermions) ont des fonctions d'onde anti-symétriques.

- Les particules identiques à **spin entier** (bosons) ont une fonction d'onde **symétrique**.
- Les particules identiques à **spin demi-entier** (fermions) ont une fonction d'onde **anti-symétrique**.

Dans la théorie des champs quantiques on peut démontrer que ceci doit être le cas pour des fermions pour qu'on puisse définir un courant conservé et pour des bosons pour qu'on puisse définir une énergie bornée par le bas. Ceci est le théorème de spin et statistique. Dans ce premier cours de mécanique quantique nous l'acceptons comme fait expérimental.

Une conséquence immédiate est le principe d'exclusion de Pauli : deux fermions ne peuvent pas être dans le même état. La combinaison anti-symétrique de $|\psi\psi\rangle$ disparaît.

Ce résultat peut être généralisé à des états avec plus de deux particules identiques. Pour des fermions, l'état multi-particules est anti-symétrique sous l'échange de deux particules tandis que pour des bosons il est symétrique. Il est de très grande importance pour la chimie et la stabilité de la matière comme nous la connaissons.

'Forces' d'échange

Ici nous illustrons la pertinence de la symétrie/anti-symétrie de la fonction d'onde pour le comportement observé de particules identiques. Nous considérons la valeur d'attente de la distance entre deux particules.

Pour simplifier la notation nous travaillons dans un espace à une dimension et nous appelons X_1 l'opérateur de position pour la première particule et X_2 celui pour la deuxième. Nous voulons calculer la valeur d'attente du carré de la distance,

$$\langle (X_1 - X_2)^2 \rangle = \langle X_1^2 \rangle + \langle X_2^2 \rangle - 2\langle X_1 X_2 \rangle ,$$

pour trois situations :

1. Les deux particules peuvent être distinguées (un électron et un proton) et elles sont dans l'état $|\psi\phi\rangle$. Nous supposons que $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ sont normalisés et, pour simplifier, orthogonaux, $\langle\psi|\phi\rangle = 0$.
2. Une paire de bosons identiques qui sont dans l'état

$$|\Psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi\phi\rangle + |\phi\psi\rangle) ,$$

3. Une paire de fermions identiques qui sont dans l'état

$$|\Psi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi\phi\rangle - |\phi\psi\rangle) .$$

Particules différentes :

Nous rappelons que les opérateurs de position sont $X_1 \equiv X \otimes \mathbb{I}$ et $X_2 \equiv \mathbb{I} \otimes X$

$$\begin{aligned}\langle X_1^2 \rangle &= \langle \psi | X^2 | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle = \langle X^2 \rangle_\psi \\ \langle X_2^2 \rangle &= \langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | X^2 | \phi \rangle = \langle X^2 \rangle_\phi \\ \langle X_1 X_2 \rangle &= \langle \psi | X | \psi \rangle \langle \phi | X | \phi \rangle = \langle X \rangle_\psi \langle X \rangle_\phi\end{aligned}$$

Ceci implique

$$\langle (X_1 - X_2)^2 \rangle_{\text{diff}} = \langle X^2 \rangle_\psi + \langle X^2 \rangle_\phi - 2 \langle X \rangle_\psi \langle X \rangle_\phi. \quad (5.7)$$

Particules identiques :

Nous combinons les signes + pour bosons et - pour fermions

$$\begin{aligned}\langle X_1^2 \rangle &= \frac{1}{2} (\langle \psi | X^2 | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle + \langle \phi | X^2 | \phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle \pm \langle \psi | X^2 | \phi \rangle \langle \phi | \psi \rangle \pm \langle \phi | X^2 | \psi \rangle \langle \psi | \phi \rangle) \\ &= \frac{1}{2} (\langle \psi | X^2 | \psi \rangle + \langle \phi | X^2 | \phi \rangle)\end{aligned}$$

De même on trouve

$$\langle X_2^2 \rangle = \frac{1}{2} (\langle \psi | X^2 | \psi \rangle + \langle \phi | X^2 | \phi \rangle)$$

Il suit que, pour $\langle X_i^2 \rangle$ les bosons et les fermions donnent le même résultat, mais ceci n'est pas le cas pour le terme croisé :

$$\begin{aligned}\langle X_1 X_2 \rangle &= \frac{1}{2} (\langle \psi | X | \psi \rangle \langle \phi | X | \phi \rangle + \langle \phi | X | \phi \rangle \langle \psi | X | \psi \rangle \pm \langle \psi | X | \phi \rangle \langle \phi | X | \psi \rangle \\ &\quad \pm \langle \phi | X | \psi \rangle \langle \psi | X | \phi \rangle) \\ &= \langle \psi | X | \psi \rangle \langle \phi | X | \phi \rangle \pm \langle \phi | X | \psi \rangle \langle \psi | X | \phi \rangle \\ &= \langle \psi | X | \psi \rangle \langle \phi | X | \phi \rangle \pm |\langle \phi | X | \psi \rangle|^2.\end{aligned}$$

La combinaison donne

$$\begin{aligned}\langle (X_1 - X_2)^2 \rangle_{b/f} &= \langle X^2 \rangle_\psi + \langle X^2 \rangle_\phi - 2 \langle X \rangle_\psi \langle X \rangle_\phi \mp 2 |\langle X \rangle_{\psi\phi}|^2 \\ &= \langle (X_1 - X_2)^2 \rangle_{\text{diff}} \mp 2 |\langle X \rangle_{\psi\phi}|^2.\end{aligned} \quad (5.8)$$

Ici le signe supérieur est pour les bosons tandis que le signe inférieur est pour les fermions et $\langle X \rangle_{\psi\phi} = \langle \psi | X | \phi \rangle$.

Les bosons sont donc en moyenne plus proches et les fermions plus éloignés l'un de l'autre, par rapport à des particules différentes. Nous notons aussi que $\langle X \rangle_{\psi\phi}$ est non-nul seulement si les fonctions d'onde se recoupent, c'est-à-dire

s'il y a des régions dans l'espace où les deux fonctions ne sont pas nulles. Par exemple un électron sur Terre n'a pas vraiment d'interaction quantique avec un électron sur Mars.

Pour les électrons dans un même atome, cet effet est très important. En chimie des molécules, on appelle ce terme d'interaction d'échange dans l'expression pour l'énergie 'the covalence bond'.

L'anti-symétrie de la fonction d'onde qui implique le principe de Pauli est aussi primordial pour la stabilité de la matière. Elle est la raison pour laquelle une collection d'atomes ne s'effondre pas en un point, et nous pouvons nous donner la main sans que nos mains passent à travers l'une de l'autre. Dans des phénomènes plus extrêmes, le principe de Pauli génère la pression de dégénérescence qui stabilise les naines blanches et les étoiles à neutron en astrophysique.

5.2 Etats intriqués et le paradoxe de Einstein-Podolsky-Rosen (EPR)

Un état à plusieurs particules est appelé 'intriqué' si il n'est pas un produit tensoriel d'états à une particule. Nous avons déjà vu des exemples comme l'état de spin 0, combiné de deux particules de spin $s = 1/2$, (le singulet $|0, 0\rangle$ dans (4.121)) ou les états $|\Psi_s\rangle$ et $|\Psi_a\rangle$ dans (5.5) et (5.6) pour $\psi \neq \phi$.

Il est facile de voir explicitement qu'un état de la forme

$$|\Psi\rangle = a|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle + b|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle, \quad (5.9)$$

avec $a \neq 0$ et $b \neq 0$, ne peut pas être écrit dans la forme $|\Psi\rangle = |\chi\rangle \otimes |\zeta\rangle$. Supposons le contraire. Comme seulement $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ apparaissent dans le résultat final nous pouvons supposer

$$|\chi\rangle = c|\psi\rangle + d|\phi\rangle \quad \text{et} \quad |\zeta\rangle = e|\psi\rangle + f|\phi\rangle.$$

Ceci donne

$$|\Psi\rangle = (c|\psi\rangle + d|\phi\rangle) \otimes (e|\psi\rangle + f|\phi\rangle).$$

Pour que ça reproduise (5.9) nous devons demander

$$cf = a, \quad de = b, \quad ce = 0, \quad \text{et} \quad df = 0,$$

ce qui n'est évidemment pas possible si a et b sont les deux non-nuls.

Pour étudier des états intriqués nous ne pouvons pas considérer les particules individuellement, mais nous devons étudier le système entier. Pour la position, comme nous l'avons montré dans la section précédente, l'intrication n'est pas importante si les particules sont bien séparées. Nonobstant, ceci n'est pas le cas pour toute observable. Par exemple, si nous considérons deux électrons dans l'état singulet, de spin total zéro,

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right), \quad (5.10)$$

l'intrication est toujours importante, indépendamment de la distance des électrons. Si nous mesurons la valeur $+\hbar/2$ de S_3 pour un des deux, l'état se réduit et l'autre électron a la valeur $-\hbar/2$ de S_3 et vice versa.

Cette intrication quantique a des conséquences assez surprenantes (pour notre conception classique de la réalité). Par exemple une question que les physicien-ne-s qui ont développé la mécanique quantique se sont souvent posée et celle des 'variables cachées' : dans le cas du spin il s'agit de la question de savoir si le spin de la particule a déjà une valeur bien fixé *avant* que la mesure soit effectuée (ce qui serait alors encodé dans des variables que nous ne connaissons pas) ou est-ce que le spin prend une valeur seulement quand la mesure est effectuée ? S'il existe des variables 'cachées', la mécanique quantique est incomplète et nous devons chercher une théorie qui la dépasse. Dans le cas contraire, le processus de mesure, et la réduction de la fonction d'onde associée, a certaines propriétés fort bizarres. Cette question est au centre du paradoxe EPR que nous discutons ici.

En 1935, Einstein, Podolsky et Rosen (EPR) ont publié un papier [3] dans lequel ils ont conclu que sans variables cachées, la mécanique quantique fait des prédictions inacceptables. Ici nous suivons la discussion de [5] qui est basée sur un papier de D. Bohm [1]. Nous considérons un pi meson (pion), une particule neutre qui a spin $s = 0$, qui se désintègre en une paire d'électron-positron. Le positron est l'anti-particule de l'électron. Il a la même masse, le même spin mais la charge opposée¹,

$$\pi^0 \rightarrow e^- + e^+. \quad (5.11)$$

Dans le référentiel de repos du pion, l'électron et le positrons se propagent dans des directions opposées. Comme le pion a spin zéro, l'électron et le positron sont dans l'état singulet par rapport au spin,

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow_- \downarrow_+\rangle - |\downarrow_- \uparrow_+\rangle \right). \quad (5.12)$$

1. Cette désintégration est très rare (branching ratio $\simeq 6 \times 10^{-8}$) mais elle se fait. Nous aurions aussi pu considérer la désintégration du pion en deux photons qui est plus commune.

Ici l'index \pm à côté du spin indique que ceci est le spin du positron (+) respectivement de l'électron (-). Comme déjà dit plus haut, si une expérience décide que l'électron a spin \uparrow en direction 3, alors le positron a spin \downarrow en direction 3 et vice versa.

La masse du pion est de $135 \text{ MeV}/c^2$, beaucoup plus grande que $m_e \simeq 0.511 \text{ MeV}/c^2$. L'électron et le positron s'éloignent donc l'un de l'autre pratiquement à la vitesse de la lumière. Si nous attendons suffisamment longtemps, les deux particules vont être très loin l'une de l'autre quand nous mesurons le spin. Admettons que nous attendons une année. Après, nous mesurons le spin de l'électron et, supposons, nous trouvons \downarrow_- . Ceci nous dit qu'à ce moment, le positron est 'forcé' d'être dans l'état \uparrow_+ . Einstein a appelé ceci 'spooky action at a distance' et Einstein Podolsky Rosen ont conclu que cette proposition n'est pas acceptable, car 'quelque chose' devrait se propager plus vite que la lumière. On pourrait essayer de proposer que la réduction de la fonction d'onde ne soit pas instantané mais à vitesse finie, de façon causale. Dans ce cas, il serait alors en principe possible que deux expériences séparées de façon spatiale (c'est-à-dire avec un vecteur genre espace) pussent mesurer \uparrow_- et \uparrow_+ . Ce qui correspond à une violation de la conservation du moment cinétique. Cette violation pourrait être communiquée après coup et ne se passerait donc pas inaperçue. Ce genre d'expériences ont été effectuées, évidemment sur des distances plus courtes, et les spins ont toujours été anti-corrélés tels que le spin total s'ajoute à zéro, comme prédit pas la mécanique quantique.

5.3 L'inégalité de Bell

L'idée que la mécanique quantique, qui est en accord avec les expériences, ne soit pas complète est séduisante, mais comme nous le montrons ici, ceci n'est pas le cas. En 1964 (neuf ans après le décès de Einstein) J.S. Bell a démontré que toute théorie 'locale' de variables cachées, donc une théorie qui n'aurait pas besoin de cette 'spooky action at a distance', n'est pas en accord avec les résultats de la mécanique quantique. qui sont, à présent, bien vérifiés par les expériences.

La proposition de Bell a été de mesurer le spin de l'électron et du positron de EPR dans des directions différentes. Nous commençons avec deux directions que nous appelons \mathbf{e} et \mathbf{n} et nous calculons le produit des spin dans ces directions, que nous appelons $P(\mathbf{e}, \mathbf{n})$. Comme \mathbf{e} et \mathbf{n} peuvent avoir un angle arbitraire entre eux, le produit des spins dans les directions correspondantes est parfois $-\hbar^2/4$ et parfois $\hbar^2/4$. Pour simplifier la notation nous mesurons,

dans ce paragraphe, le spin en unités $\hbar/2$, donc les résultats sont $P(\mathbf{e}, \mathbf{n}) = \pm 1$. Par exemple $P(\mathbf{n}, \mathbf{n}) = -1$ et $P(\mathbf{n}, -\mathbf{n}) = 1$.

Bell a alors calculé la valeur d'attente $\langle P(\mathbf{e}, \mathbf{n}) \rangle$ comme fonction du produit scalaire $\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}$. En toute généralité, dans nos unités, l'opérateur du spin est $\boldsymbol{\sigma}$ et le spin dans une direction \mathbf{n} est donc donné par l'opérateur

$$\tilde{\mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (5.13)$$

Pour l'état (5.12), nous obtenons

$$\begin{aligned} \langle P(\mathbf{e}, \mathbf{n}) \rangle &= \\ \langle \Psi | \tilde{\mathbf{e}} \tilde{\mathbf{n}} | \Psi \rangle &= \frac{1}{2} \left(\langle \uparrow | \tilde{\mathbf{e}} | \uparrow \rangle \langle \downarrow | \tilde{\mathbf{n}} | \downarrow \rangle - \langle \uparrow | \tilde{\mathbf{e}} | \downarrow \rangle \langle \downarrow | \tilde{\mathbf{n}} | \uparrow \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle \downarrow | \tilde{\mathbf{e}} | \uparrow \rangle \langle \uparrow | \tilde{\mathbf{n}} | \downarrow \rangle + \langle \downarrow | \tilde{\mathbf{e}} | \downarrow \rangle \langle \uparrow | \tilde{\mathbf{n}} | \uparrow \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(-e_3 n_3 - (e_1 - ie_2)(n_1 + in_2) - (e_1 + ie_2)(n_1 - in_2) - e_3 n_3 \right) \\ &= -\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Nous supposons alors qu'il existe une 'variable cachée', appelons la λ , qui définit entièrement l'état du spin au moment où la désintégration du pion se fait, telle que le résultat de la mesure du spin de l'électron est indépendant de l'orientation \mathbf{e} du détecteur, car nous pouvons la changer à la dernière minute avant la mesure, quand l'électron et le positron sont déjà très loin l'un de l'autre et ont déjà pris leur valeur du spin, donc quand l'information n'a plus le temps de se propager de l'électron au positron. Dans ce cas, il existe une fonction $A(\mathbf{e}, \lambda)$ qui détermine le résultat pour le spin de l'électron en direction \mathbf{e} , et une fonction $B(\mathbf{n}, \lambda)$ qui détermine le résultat pour le spin du positron en direction \mathbf{n} . Les deux fonctions ne peuvent prendre que les valeurs ± 1 (rappelez-vous, nous mesurons le spin en unités de $\hbar/2$),

$$A(\mathbf{e}, \lambda) = \pm 1, \quad B(\mathbf{n}, \lambda) = \pm 1. \quad (5.15)$$

De plus, si $\mathbf{e} = \mathbf{n}$, la conservation du moment cinétique (et les résultats expérimentaux) requièrent que

$$A(\mathbf{n}, \lambda) = -B(\mathbf{n}, \lambda), \quad \forall \lambda. \quad (5.16)$$

La valeur d'attente peut alors être écrite comme

$$\langle P(\mathbf{e}, \mathbf{n}) \rangle = \int \rho(\lambda) A(\mathbf{e}, \lambda) B(\mathbf{n}, \lambda) d\lambda, \quad (5.17)$$

où $\rho(\lambda)$ est une densité de probabilité de la variable cachée que nous ne connaissons pas. Avec (5.16) nous pouvons éliminer B et écrire

$$\langle P(\mathbf{e}, \mathbf{n}) \rangle = - \int \rho(\lambda) A(\mathbf{e}, \lambda) A(\mathbf{n}, \lambda) d\lambda. \quad (5.18)$$

Nous introduisons encore une troisième direction \mathbf{v} et nous trouvons

$$\langle P(\mathbf{e}, \mathbf{n}) \rangle - \langle P(\mathbf{e}, \mathbf{v}) \rangle = - \int \rho(\lambda) [A(\mathbf{e}, \lambda) A(\mathbf{n}, \lambda) - A(\mathbf{e}, \lambda) A(\mathbf{v}, \lambda)] d\lambda. \quad (5.19)$$

En utilisant que $A^2(\mathbf{n}, \lambda) = 1$ nous pouvons aussi écrire ceci comme

$$\langle P(\mathbf{e}, \mathbf{n}) \rangle - \langle P(\mathbf{e}, \mathbf{v}) \rangle = - \int \rho(\lambda) [1 - A(\mathbf{n}, \lambda) A(\mathbf{v}, \lambda)] A(\mathbf{e}, \lambda) A(\mathbf{n}, \lambda) d\lambda. \quad (5.20)$$

De plus, nous avons que $|A(\mathbf{e}, \lambda) A(\mathbf{n}, \lambda)| = 1$ et $\rho(\lambda) \geq 0$ ainsi que $[1 - A(\mathbf{n}, \lambda) A(\mathbf{v}, \lambda)] \geq 0$, nous trouvons donc

$$|\langle P(\mathbf{e}, \mathbf{n}) \rangle - \langle P(\mathbf{e}, \mathbf{v}) \rangle| \leq \int \rho(\lambda) [1 - A(\mathbf{n}, \lambda) A(\mathbf{v}, \lambda)] d\lambda. \quad (5.21)$$

Comme ρ est normalisé, et comme le dernier terme est $\langle P(\mathbf{n}, \mathbf{v}) \rangle$, ceci donne la célèbre inégalité de Bell,

$$\boxed{|\langle P(\mathbf{e}, \mathbf{n}) \rangle - \langle P(\mathbf{e}, \mathbf{v}) \rangle| \leq 1 + \langle P(\mathbf{n}, \mathbf{v}) \rangle}. \quad (5.22)$$

Avec le résultat $\langle P(\mathbf{e}, \mathbf{n}) \rangle = -\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}$ de la mécanique quantique, voir (5.14), il est alors facile de montrer que cette inégalité est violée par la mécanique quantique. A titre d'exemple, prenons \mathbf{e} et \mathbf{n} orthogonaux donc $\mathbf{e} \cdot \mathbf{n} = 0$ et \mathbf{v} au milieu entre les deux, tel qu'il soutienne un angle de 45° avec les deux et $\mathbf{e} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = 1/\sqrt{2}$. L'inégalité de Bell donne alors

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \simeq 0.707 \leq 1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \simeq 0.293,$$

ce qui est clairement faux, et pas de peu, mais largement !

Le paradoxe EPR ensemble avec l'inégalité de Bell montrent qu'on ne peut pas se sauver de cette 'spooky action at a distance' avec des variables cachées. Par ailleurs, ils nous donnent des nouveaux tests de la mécanique quantique. Si EPR était correct et il existait des variables cachées, certaines prédictions de la mécanique quantique seraient fausses. Par contre, si les prédictions de la mécanique quantique sont en accord avec les expériences, il n'y a pas de théorie de variables cachées qui peut remplacer la mécanique quantique.

Des expériences pour tester l'inégalité de Bell ont en effet été effectuées et les résultats sont clairs : la mécanique quantique donne la bonne prédiction, l'inégalité de Bell est violée. (Prix Nobel de physique 2022 à Aspect, Clauser et Zeilinger : "for experiments with entangled photons, establishing the violation of Bell inequalities and pioneering quantum information science".)

Il semble alors que nous devons vivre avec la 'spooky action at a distance' d'Einstein ; mais ceci n'est pas si grave. Il n'est quand même pas possible de transmettre de l'information instantanément, ou plus vite que la vitesse de la lumière avec la réduction de la fonction d'onde. Le résultat dans les détecteurs est entièrement aléatoire. C'est seulement quand nous comparons les résultats que nous pouvons constater la corrélation. D'après nos connaissances aucune forme d'énergie ou d'information ne peut être transmise à des vitesses plus grandes que la vitesse de la lumière. Cependant, pour des effets qui ne transmettent aucune information, comme la réduction du paquet d'onde, de telles limitations ne semble pas exister.

5.4 Le théorème de non-clonage

Comme nous le savons, en général, une mesure change l'état du système. Pour cette raison nous ne pouvons pas connaître, par exemple, les composantes 1 et 3 du spin d'une particule. Un fois que nous avons mesuré S_3 , la composante S_1 est entièrement inconnue et vice versa. Cependant, il pourrait y avoir une issue : si nous pouvons faire une copie parfaite de notre état, nous pourrions mesurer S_3 dans la première copie et S_1 dans la deuxième et ainsi connaître les deux, S_3 et S_1 de l'état original.

Si le clonage était possible, la mécanique quantique aurait donc de grands problèmes. Il serait non seulement possible de contourner le principe d'incertitude, mais on pourrait aussi envoyer des messages plus vite que la lumière avec une situation EPR : imaginez deux personnes (Alice et Bob) qui sont éloignées de deux années-lumière et Alice obtient l'électron et Bob le positron du pion qui s'est désintégré il y a un an. Bob a peut-être mesuré le spin du positron en direction 3 ou non. Si Alice mesure le spin en direction 3 de son électron, elle mesure $\pm\hbar/2$, mais elle ne sait pas si Bob a mesuré le spin ou pas. Elle ne sait pas si avant sa mesure son électron était dans l'état mixte de \uparrow et \downarrow ou dans un des deux. Par contre si elle peut 'cloner' son électron en mille copies dans le même état et qu'elle mesure spin $+\hbar/2$ dans tous ces cas, elle sait que Bob a fait la mesure, et il a mesuré spin $-\hbar/2$. Par contre, si dans certain cas elle mesure $+\hbar/2$ et dans d'autres $-\hbar/2$, elle sait que Bob n'a pas fait la mesure, parce que son électron était dans l'état mixte avant la mesure.

De plus, si Alice fait son expérience en moins de 2 ans, cette information lui arrive plus vite qu'un signal lumineux qui serait parti de Bob.

Il est facile de voir qu'en mécanique quantique, le 'cloning parfait' n'est pas possible. L'argument de base marche comme suit : nous démontrons qu'il ne peut pas exister d'opérateur linéaire qui prend une paire d'états, $|\psi\rangle$ et $|X\rangle$ et le convertit en deux copies de $|\psi\rangle$,

$$|\psi\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle; \quad (5.23)$$

et ceci pour tout état $|\psi\rangle$. Comme l'évolution dans le temps en mécanique quantique est linéaire, il est naturel de demander que notre opérateur soit un opérateur linéaire. Nous supposons qu'un tel opérateur existe. Pour deux états $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ nous aurons alors

$$|\psi_1\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle|\psi_1\rangle, \quad \text{et} \quad |\psi_2\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle \quad (5.24)$$

Par contre, qu'est ce que fait notre opérateur avec la combinaison linéaire, $|\psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle$? La linéarité impose que

$$|\psi\rangle|X\rangle \rightarrow \alpha|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle|\psi_2\rangle \neq (\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle)(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle). \quad (5.25)$$

Malgré ce résultat évident, il y a de la recherche actuelle à ce sujet : pouvons-nous 'cloner' certains états mais pas les combinaisons linéaires de ceux-ci? Est-ce qu'on peut d'une certaine façon produire une évolution temporelle non-linéaire? Pour le moment, malgré tout, le résultat est que des états quantiques ne peuvent pas être 'clonés'.

FIN

Annexe A

ANNEXES MATHÉMATIQUES

A.1 Intégrales de Fresnel

Les intégrales de Fresnel sont définies par

$$S(y) = \int_0^y du \sin(u^2) = \sum_0^{\infty} \frac{(-1)^n y^{4n+3}}{(2n+1)!(4n+3)}, \quad (\text{A.1})$$

$$C(y) = \int_0^y du \cos(u^2) = \sum_0^{\infty} \frac{(-1)^n y^{4n+1}}{(2n)!(4n+1)}. \quad (\text{A.2})$$

Ces séries convergent pour tout $y \in \mathbb{C}$, les fonctions de Fresnel sont alors des fonctions entières, voir fig. A.1. Nous sommes intéressés aux limites $\lim_{y \rightarrow \infty} (C(y) - iS(y))$. Pour ceci, nous effectuons l'intégrale $\int \exp(-z^2) dz$ le long du chemin indiqué dans la fig. A.2. Dans la limite $R \rightarrow \infty$, l'intégrale le long γ_2 tend vers zéro. L'intégrale le long de γ_1 est une demi-intégrale gaussienne et donne $\int_0^{\infty} \exp(-z^2) dz = \sqrt{\pi}/2$. Avec $z = u \exp(i\pi/4)$ l'intégrale le long de γ_3 devient

$$\int_{\gamma_3} e^{-z^2} dz = \exp(i\pi/4) \int_0^{\infty} e^{-iu^2} du = \sqrt{i} [C(\infty) - iS(\infty)] = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

Pour le dernier signe d'égalité nous avons utilisé le théorème de Cauchy,

$$0 = \oint_{\gamma} \exp(-z^2) dz = \lim_{R \rightarrow \infty} \left(\int_{\gamma_1} e^{-z^2} dz - \int_{\gamma_3} e^{-z^2} dz \right).$$

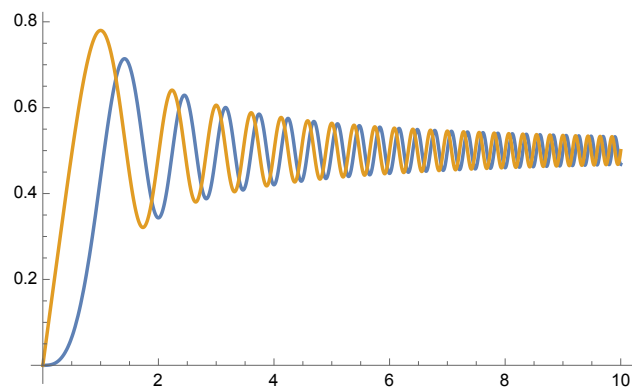


FIGURE A.1 – Les fonctions de Fresnel $S(y)$ (bleu) et $C(y)$, orange.

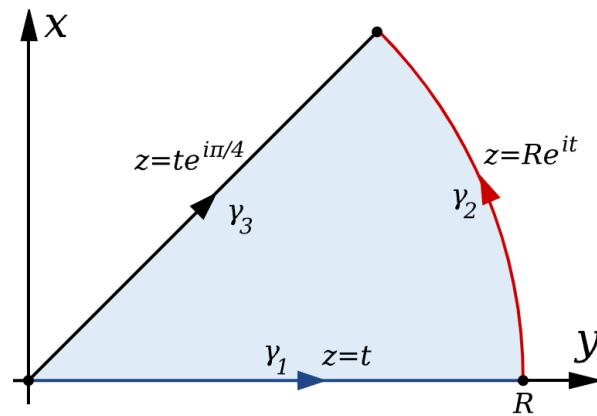


FIGURE A.2 – Le contour pour l'intégrale de Fresnel $C(y) + iS(y)$ dans le plan complexe.

Pour nos intégrales du cours et (1.28), ceci donne

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iu^2} du = \sqrt{\frac{\pi}{i}}. \quad (\text{A.3})$$

A.2 Les harmoniques sphériques

Soit \mathcal{H}_ℓ l'espace des polynômes homogènes de degré ℓ sur \mathbb{R}^3 . Pour $(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$, $u_\ell \in \mathcal{H}_\ell$ est donc de la forme

$$u_\ell(\mathbf{x}) = \sum_{\substack{i,j,k \\ i+j+k=\ell}} c_{ijk} x_1^i x_2^j x_3^k, \quad (\text{A.4})$$

avec des coefficients $c_{ijk} \in \mathbb{C}$ arbitraires. La dimension de \mathcal{H}_ℓ est le nombre de triplets (i, j, k) ordonnés avec $i, j, k \in \mathbb{N}_0$ et $i + j + k = \ell$. Nous ordonnons ces triplets comme indiqué dans le tableau :

i	j	k
ℓ	0	0
$\ell - 1$	0	1
	1	0
$\ell - 2$	0	2
	1	1
	2	0
\vdots		
0	0	ℓ
	1	$\ell - 1$
	\vdots	\vdots
	ℓ	0

De ce tableau nous concluons que

$$\dim \mathcal{H}_\ell = 1 + 2 + \cdots + \ell + 1 = \frac{1}{2}(\ell + 1)(\ell + 2). \quad (\text{A.5})$$

Sur \mathcal{H}_ℓ nous introduisons le produit scalaire suivant

$$\langle u_\ell, v_\ell \rangle = \int_{\mathbb{S}^2} \bar{u}_\ell(\hat{\mathbf{x}}) v_\ell(\hat{\mathbf{x}}) d\Omega, \quad \hat{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|} \quad (\text{A.6})$$

où $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ est la mesure usuelle sur la sphère \mathbb{S}^2 . La mesure $d\Omega$ est invariante sous rotations. C'est-à-dire que pour une fonction dans $L^2(\mathbb{S}^2, d\Omega)$, et une rotation $R \in SO(3)$

$$\int_{\mathbb{S}^2} f(R\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\mathbb{S}^2} f(\mathbf{x}) d\Omega. \quad (\text{A.7})$$

Avec le produit scalaire introduit en (A.6), \mathcal{H}_ℓ est un espace vectoriel complexe muni d'un produit scalaire (espace unitaire). Le groupe $SO(3)$ est représenté de façon naturelle sur \mathcal{H}_ℓ via

$$U : SO(3) \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H}_\ell) : R \mapsto U(R), \quad (U(R)u_\ell)(\mathbf{x}) = u_\ell(R^{-1}\mathbf{x}). \quad (\text{A.8})$$

Ici $\mathcal{U}(\mathcal{H}_\ell)$ l'espace des applications (opérateurs) linéaires unitaires sur \mathcal{H}_ℓ . Ce sont les opérateurs linéaires O avec $\|Ou\| = \|u\|$ pour tout $u \in \mathcal{H}_\ell$. Nous considérons alors le laplacien sur \mathcal{H}_ℓ ,

$$\Delta : \mathcal{H}_\ell \rightarrow \mathcal{H}_{\ell-2} : u_\ell \mapsto \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 u_\ell}{\partial x_j^2}. \quad (\text{A.9})$$

Le laplacien Δ est une application linéaire de \mathcal{H}_ℓ dans $\mathcal{H}_{\ell-2}$. Nous appelons son noyau V_ℓ ,

$$V_\ell = \{u_\ell \in \mathcal{H}_\ell \mid \Delta u_\ell = 0\}.$$

Pour $\ell = 0$ et 1 $V_\ell = \mathcal{H}_\ell$, et pour $\ell \geq 2$ nous avons¹,

$$\dim V_\ell \geq \dim \mathcal{H}_\ell - \dim \mathcal{H}_{\ell-2} = \frac{1}{2}(\ell+1)(\ell+2) - \frac{1}{2}(\ell-1)\ell = 2\ell + 1. \quad (\text{A.10})$$

Définition A.1. *Un polynôme homogène u_ℓ dans V_ℓ réduit sur la sphère \mathbb{S}^2 est une harmonique sphérique de degré ℓ . Nous dénommons l'ensemble de ces fonctions sur la sphère par \mathcal{V}_ℓ .*

Notez, que \bar{Y}_ℓ est aussi une harmonique sphérique de degré ℓ . Sur \mathcal{V}_ℓ nous introduisons le produit scalaire

$$\langle Y_\ell, Y'_\ell \rangle = \int_{\mathbb{S}^2} \bar{Y}_\ell(\mathbf{n}) Y'_\ell(\mathbf{n}) d\Omega \quad (\text{A.11})$$

Toute fonction $u_\ell \in V_\ell$ peut être écrite comme $u_\ell(\mathbf{x}) = |\mathbf{x}|^\ell Y_\ell(\hat{\mathbf{x}})$ pour une harmonique sphérique Y_ℓ .

Nous considérons alors $L^2(\mathbb{S}^2, d\Omega)$. On peut démontrer que les fonctions continues sont denses dans cet espace, et que les polynômes les génèrent (Weierstrass, voir cours d'analyse réelle).

Evidemment, \mathcal{V}_ℓ est un sous-espace de dimension finie de $L^2(\mathbb{S}^2, d\Omega)$.

Lemme A.1. *Les sous-espaces \mathcal{V}_ℓ et $\mathcal{V}_{\ell'}$ de $L^2(\mathbb{S}^2, d\Omega)$ sont orthogonaux pour $\ell \neq \ell'$.*

1. Ceci est une conséquence du 'rank-nullity' théorème, pour une application linéaire $L : W_1 \rightarrow W_2$, alors $\dim(\ker L) = \dim W_1 - \dim(\text{im } L)$ (voir cours d'algèbre linéaire).

Preuve. Nous utilisons le théorème de Green sur la balle $B = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \mid |\mathbf{x}| \leq 1\}$ pour des fonctions $u_\ell \in V_\ell$ et $v_{\ell'} \in V_{\ell'}$. Ceci donne

$$\begin{aligned} 0 &= \int_B (\bar{u}_\ell \Delta v_{\ell'} - v_{\ell'} \Delta \bar{u}_\ell) d^3x = \int_{\mathbb{S}^2} \left(\bar{u}_\ell \frac{\partial v_{\ell'}}{\partial r} - v_{\ell'} \frac{\partial \bar{u}_\ell}{\partial r} \right) d\Omega \\ &= \int_{\mathbb{S}^2} (\bar{Y}_\ell \ell' Y_{\ell'} - Y_{\ell'} \ell \bar{Y}_\ell) d\Omega = (\ell' - \ell) \int_{\mathbb{S}^2} \bar{Y}_\ell Y_{\ell'} d\Omega. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Ici nous avons choisi les harmoniques sphériques Y_ℓ et $Y_{\ell'}$ telles que $u_\ell = r^\ell Y_\ell$ et $v_{\ell'} = r^{\ell'} Y_{\ell'}$ pour $r = |\mathbf{x}|$. \square

Maintenant, nous démontrons la proposition suivante.

Proposition A.1. Les espaces vectoriels $r^{2k} V_{\ell-2k} = \{r^{2k} v_{\ell-2k} \mid v_{\ell-2k} \in V_{\ell-2k}\}$ sont des sous-espaces orthogonaux de \mathcal{H}_ℓ et nous avons

$$\mathcal{H}_\ell = \bigoplus_{k=0}^{[\ell/2]} r^{2k} V_{\ell-2k}, \quad (\text{A.13})$$

et

$$\dim V_\ell = 2\ell + 1. \quad (\text{A.14})$$

Preuve. Evidemment, les espaces $r^{2k} V_{\ell-2k}$ sont des sous-espaces de \mathcal{H}_ℓ et d'après le lemme ils sont orthogonaux. Ceci implique

$$\dim \mathcal{H}_\ell \geq \sum_{k=0}^{[\ell/2]} \dim V_{\ell-2k} \geq \sum_{k=0}^{[\ell/2]} (2\ell - 4k + 1) = \frac{1}{2}(\ell + 1)(\ell + 2) = \dim \mathcal{H}_\ell. \quad (\text{A.15})$$

Cette série d'égalités et inégalités ne peut être satisfaite que si chaque signe d'inégalité est une égalité et donc $\dim V_n = 2n + 1$ et $\mathcal{H}_\ell = \bigoplus r^{2k} V_{\ell-2k}$. \square

Notez aussi que avec (A.10) $\dim V_\ell = 2\ell + 1$ implique que l'application $\Delta : \mathcal{H}_\ell \rightarrow \mathcal{H}_{\ell-2}$ est surjective, c'est-à-dire $\Delta(\mathcal{H}_\ell) = \mathcal{H}_{\ell-2}$.

Proposition A.2. Soit Λ le Laplacien sur la sphère défini dans (1.122). Pour $Y_\ell \in \mathcal{V}_\ell$, nous avons

$$\Lambda Y_\ell = -\ell(\ell + 1)Y_\ell.$$

Preuve. (prop. A.2) Nous considérons le polynôme homogène de degré ℓ donné par $v_\ell = r^\ell Y_\ell$. Comme $v_\ell \in V_\ell$ il est $\Delta v_\ell = 0$. D'après (1.121) on a

$$\Delta v_\ell = \frac{d^2 v_\ell}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dv_\ell}{dr} + \frac{1}{r^2} \Lambda v_\ell = 0 \quad (\text{A.16})$$

Ceci implique

$$0 = \ell(\ell - 1)r^{\ell-2}Y_\ell + 2\ell r^{\ell-2}Y_\ell + r^{\ell-2}\Lambda Y_\ell \quad (\text{A.17})$$

$$= [\ell(\ell + 1)Y_\ell + \Lambda Y_\ell] r^{\ell-2}. \quad (\text{A.18})$$

□

Lemme A.2. *Les sous-espaces V_ℓ sont invariants sous la représentation (A.8) de $SO(3)$.*

Preuve. Soit $\mathbf{x}' = R^{-1}\mathbf{x}$ et $u_\ell \in \mathcal{H}_\ell$. Un simple calcul montre que

$$\sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 u_\ell(\mathbf{x})}{\partial x_j^2} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 u_\ell(\mathbf{x}')}{\partial x_j'^2}.$$

Si $u_\ell \in V_\ell$, ceci est donc aussi vrai pour $U(R)u_\ell$. □

Avec la proposition A.1 nous avons donc réduit la représentation U des $SO(3)$ sur \mathcal{H}_ℓ . La restriction de U sur $r^{2k}V_{\ell-2k}$ est même irréductible, c'est-à-dire que $r^{2k}V_{\ell-2k}$ ne contient pas de sous-espaces non-triviaux qui soient invariants sous U . C'est-à-dire : soit $W \subset r^{2k}V_{\ell-2k}$ un sous-espace avec $U(R)v \in W \forall v \in W$ et $\forall R \in SO(3)$. Alors $W = \{0\}$ ou $W = r^{2k}V_{\ell-2k}$. Dans la suite, nous n'avons pas besoin de ce fait et nous ne le démontrons pas. Ceci deviendra clair dans notre traitement du moment cinétique plus tard.

Nous définissons aussi sur \mathcal{V}_ℓ la représentation

$$(\mathcal{U}(R)Y_\ell)(\mathbf{n}) = Y_\ell(R^{-1}\mathbf{n}). \quad (\text{A.19})$$

D'après le lemme, \mathcal{V}_ℓ est invariant sous $\mathcal{U}(R)$. Evidemment $\dim \mathcal{V}_\ell = \dim V_\ell$. Donc, d'après (A.14) nous avons

$$\dim \mathcal{V}_\ell = \dim V_\ell = 2\ell + 1. \quad (\text{A.20})$$

Nous démontrons encore que les harmoniques sphériques engendrent $L^2(\mathbb{S}^2, d\Omega)$ et nous allons construire une base orthonormée d'harmoniques sphériques.

Théorème A.1. *Les harmoniques sphériques engendrent $L^2(\mathbb{S}^2, d\Omega)$.*

Preuve. Soit p_L un polynôme de degré L . Nous l'écrivons comme somme de polynômes homogènes d'ordres $\ell \leq L$,

$$p_L = \sum_{\ell=0}^L u_\ell.$$

De plus, les polynômes $\pi_L = p_L|_{\mathbb{S}^2}$ sont denses dans l'espace des fonctions continues sur \mathbb{S}^2 (thm. de Weierstrass) et les fonctions continues sont denses dans $L^2(\mathbb{S}^2, d\Omega)$. Comme toute fonction u_ℓ sur \mathbb{S}^2 est une combinaison linéaire de $u_{\ell'} \in V_{\ell'}$, $\ell' \leq \ell$, il suit que tout polynôme π_L est de la forme

$$\pi_L = \sum_{\ell=0}^L Y_\ell, \quad Y_\ell \in \mathcal{V}_\ell.$$

□

Nous avons donc démontré le corollaire suivant.

Corollaire A.1. *Les harmoniques sphériques, $\{Y_\ell | Y_\ell \in \mathcal{V}_\ell, \ell \in \mathbb{N}_0\}$ engendrent $L^2(\mathbb{S}^2, d\Omega)$. Si pour ℓ fixé l'ensemble $\{Y_{\ell m} | -\ell \leq m \leq \ell\}$ forme une base orthonormée de \mathcal{V}_ℓ alors les ensembles*

$$\{Y_{\ell m} | \ell \in \mathbb{N}_0, -\ell \leq m \leq \ell\}$$

forment une base orthonormée de $L^2(\mathbb{S}^2, d\Omega)$.

Nous construisons maintenant explicitement une telle base.

D'abord nous remarquons que pour une fonction (deux fois différentiable) $f(\tau, t)$ sur $\mathbb{C} \times [-\pi, \pi]$ la fonction

$$\Phi(\mathbf{x}) := \int_{-\pi}^{\pi} dt f(z + ix \cos t + iy \sin t, t), \quad \mathbf{x} = (x, y, z)$$

satisfait l'équation de Laplace, $\Delta\Phi = 0$. En effet

$$\Delta\Phi(\mathbf{x}) = \int_{-\pi}^{\pi} dt (1 - \sin^2 t - \cos^2 t) f''(z + ix \cos t + iy \sin t, t) = 0. \quad (\text{A.21})$$

Ici un prime indique la dérivée par rapport au premier argument, τ . Nous considérons pour f les fonctions $\tau^\ell \cos(mt)$, $0 \leq m \leq \ell$ et $\tau^\ell \sin(mt)$, $1 \leq m \leq \ell$. Elles génèrent des polynômes homogènes de degré ℓ , et avec (A.21) donc des éléments de V_ℓ .

$$\int_{-\pi}^{\pi} (z + ix \cos t + iy \sin t)^\ell \cos(mt) dt, \quad (\text{A.22})$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} (z + ix \cos t + iy \sin t)^\ell \sin(mt) dt. \quad (\text{A.23})$$

En coordonnées sphériques, (r, ϑ, φ) , sur \mathbb{S}^2 (c'est-à-dire pour $r = 1$) ces fonctions sont

$$\int_{-\pi}^{\pi} (\cos \vartheta + i \sin \vartheta \cos \varphi \cos t + i \sin \vartheta \sin \varphi \sin t)^\ell \cos(mt) dt = \int_{-\pi-\varphi}^{\pi-\varphi} (\cos \vartheta + i \sin \vartheta \cos \psi)^\ell \cos(m(\psi + \varphi)) d\psi, \quad (\text{A.24})$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} (\cos \vartheta + i \sin \vartheta \cos \varphi \cos t + i \sin \vartheta \sin \varphi \sin t)^\ell \sin(mt) dt = \int_{-\pi-\varphi}^{\pi-\varphi} (\cos \vartheta + i \sin \vartheta \cos \psi)^\ell \sin(m(\psi + \varphi)) d\psi. \quad (\text{A.25})$$

Comme l'intégrale se fait sur une période entière nous pouvons re-changer les limites à $-\pi, \pi$. Dans les fonctions $\cos(m(\psi + \varphi)) = \cos(m\psi) \cos(m\varphi) - \sin(m\psi) \sin(m\varphi)$ et $\sin(m(\psi + \varphi)) = \cos(m\psi) \sin(m\varphi) + \sin(m\psi) \cos(m\varphi)$, le deuxième terme ne contribue pas dans l'intégrale car il est impair en ψ tandis que $(\cos \vartheta + i \sin \vartheta \cos \psi)^\ell$ est pair. Les intégrales (A.24) et (A.25) donnent alors

$$\cos(m\varphi)Q_\ell^m(\vartheta) \text{ et } \sin(m\varphi)Q_\ell^m(\vartheta) \quad \text{avec} \quad (\text{A.26})$$

$$Q_\ell^m(\vartheta) = \int_{-\pi}^{\pi} (\cos \vartheta + i \sin \vartheta \cos \psi)^\ell \cos(m\psi) d\psi. \quad (\text{A.27})$$

Nous définissons aussi

$$P_\ell^0(x) \equiv P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} \left[(x^2 - 1)^\ell \right], \quad (\text{A.28})$$

$$P_\ell^m(x) \equiv (-1)^m (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_\ell(x) \quad (\text{A.29})$$

$$= (-1)^m \frac{(1 - x^2)^{m/2}}{2^\ell \ell!} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} \left[(x^2 - 1)^\ell \right]. \quad (\text{A.30})$$

Les P_ℓ sont des polynômes de degré ℓ appelés 'Polynômes de Legendre', et les P_ℓ^m sont les 'fonctions associées de Legendre'. L'éq. (A.28) est appelée la 'formule de Rodrigus'. Pour m pair ce sont également des polynômes de degré ℓ mais pour m impair ils contiennent un facteur $\sqrt{1 - x^2}$. Notez aussi que pour $m \neq 0$, $P_\ell^m(1) = 0$. Les polynômes de Legendre sont bien définis et réels sur l'intervalle $-1 \leq x \leq 1$. Nous démontrons alors que les

$$P_\ell^m(\cos \vartheta) \equiv (-1)^m e^{-im\pi/2} \frac{(\ell + m)!}{\ell!} Q_\ell^m(\vartheta),$$

donc les $P_\ell^m(x)$ sont déterminés par les intégrales (A.27).

D'abord, nous constatons que d'après la formule de Cauchy

$$(x^2 - 1)^\ell = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{(z^2 - 1)^\ell}{z - x} dz. \quad (\text{A.31})$$

Ici γ est un chemin fermé (arbitraire) qui entoure le point x . $2^\ell P_\ell$ est le terme d'ordre ℓ dans la série de Taylor de $(x^2 - 1)^\ell$, et donc

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^{\ell+1}\pi i} \oint_{\gamma} \frac{(z^2 - 1)^\ell}{(z - x)^{\ell+1}} dz. \quad (\text{A.32})$$

Nous supposons $x \neq \pm 1$ et choisissons pour γ un cercle autour de x avec rayon $\sqrt{1 - x^2}$, ce qui implique

$$z = x + \sqrt{x^2 - 1}e^{i\psi}, \quad -\pi \leq \psi \leq \pi \quad (\text{A.33})$$

$$dz = i\sqrt{x^2 - 1}e^{i\psi} d\psi = i(z - x)d\psi. \quad (\text{A.34})$$

Avec ceci, nous avons

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{(x + \sqrt{x^2 - 1}e^{i\psi} + 1)(x + \sqrt{x^2 - 1}e^{i\psi} - 1)}{2\sqrt{x^2 - 1}e^{i\psi}} \right]^\ell d\psi, \quad (\text{A.35})$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[x + \sqrt{x^2 - 1} \cos \psi \right]^\ell d\psi \quad (\text{A.36})$$

$$P_\ell(\cos \vartheta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [\cos \vartheta + i \sin \vartheta \cos \psi]^\ell d\psi = Q_\ell^0(\vartheta). \quad (\text{A.37})$$

Le calcul pour démontrer que

$$P_\ell^m(\cos \vartheta) = (-1)^m e^{-im\pi/2} \frac{(\ell + m)!}{\ell!} Q_\ell^m(\vartheta), \quad m \neq 0$$

est similaire :

$$\begin{aligned} P_\ell^m(x) &= \frac{(\ell + 1) \cdots (\ell + m)}{2^{\ell+1}i\pi} \oint_{\gamma} \frac{(z^2 - 1)^\ell (1 - x^2)^{m/2}}{(z - x)^{\ell+m}} dz \\ &= \frac{(\ell + 1) \cdots (\ell + m)}{2\pi} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[x + \sqrt{x^2 - 1} \cos \psi \right]^\ell \left(\sqrt{\frac{1 - x^2}{x^2 - 1}} \right)^m e^{-im\psi} d\psi \\ &= e^{im\pi/2} \frac{(\ell + m)!}{\ell! 2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[x + \sqrt{x^2 - 1} \cos \psi \right]^\ell \cos(m\psi) d\psi, \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

$$P_\ell^m(\cos \vartheta) = e^{im\pi/2} \frac{(\ell + m)!}{\ell!} Q_\ell^m(\vartheta). \quad (\text{A.39})$$

De l'éq. (A.39) il suit en particulier que

$$P_\ell^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} P_\ell^m(x). \quad (\text{A.40})$$

A D'autres relations utiles sont

$$P_\ell^{m+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} [(\ell - m)xP_\ell^m(x) - (\ell + m)P_{\ell-1}^m(x)], \quad (\text{A.41})$$

$$P_{\ell+1}^m(x) = \frac{1}{\ell - m + 1} [(2\ell + 1)xP_\ell^m(x) - (\ell + m)P_{\ell-1}^m(x)]. \quad (\text{A.42})$$

Comme exercice on peut dériver les normalisations,

$$\int_{-1}^1 [P_\ell^m(x)]^2 dx = \frac{2}{2\ell + 1} \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!}, \quad (\text{A.43})$$

$$\int_{\mathbb{S}^2} [P_\ell(\cos \vartheta)]^2 d\Omega = \frac{4\pi}{2\ell + 1}, \quad (\text{A.44})$$

$$\int_{\mathbb{S}^2} [P_\ell^m(\cos \vartheta) \cos(m\phi)]^2 d\Omega = \frac{2\pi}{2\ell + 1} \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!}, \quad (\text{A.45})$$

$$\int_{\mathbb{S}^2} [P_\ell^m(\cos \vartheta) \sin(m\phi)]^2 d\Omega = \frac{2\pi}{2\ell + 1} \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!}. \quad (\text{A.46})$$

Les harmoniques sphériques sont définies par

$$Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} P_\ell^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad -\ell \leq m \leq \ell. \quad (\text{A.47})$$

Ces fonctions sont orthonormées,

$$\int_{\mathbb{S}^2} \bar{Y}_{\ell m}(\vartheta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\vartheta, \varphi) d\Omega = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}. \quad (\text{A.48})$$

De plus, avec (A.40), on a la relation de conjugaison

$$Y_{\ell -m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m \bar{Y}_{\ell m}(\vartheta, \varphi). \quad (\text{A.49})$$

Notez aussi que

$$Y_{\ell 0}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi}} P_\ell(\cos \vartheta). \quad (\text{A.50})$$

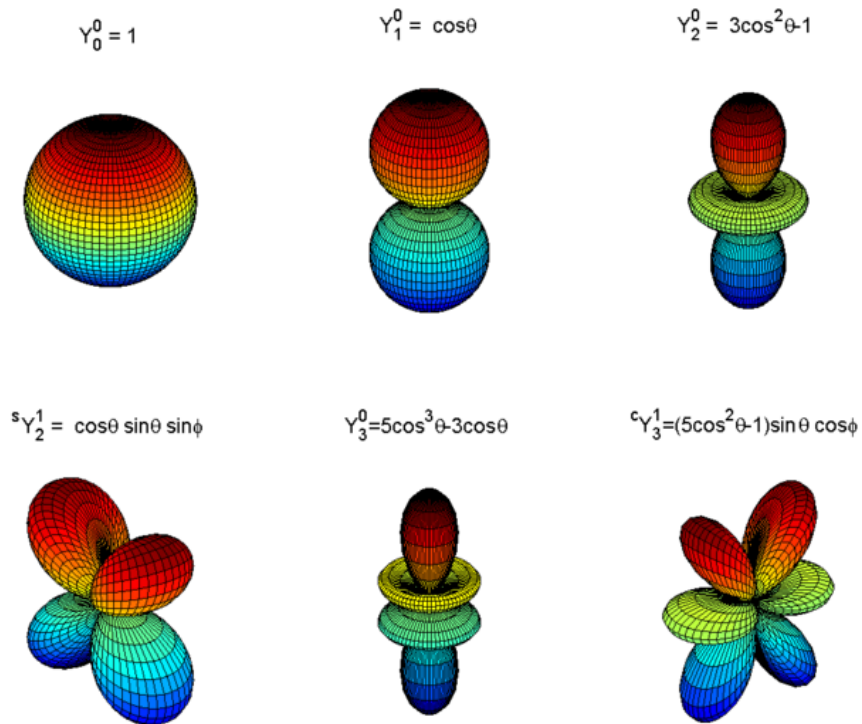


FIGURE A.3 – Quelques harmoniques sphériques pour $\ell \leq 3$. Le superscript *s/c* indique que la forme réelle $\propto \sin(m\varphi)$ / $\cos m\varphi$ est montrée au lieu de la forme complexe $\propto \exp(im\varphi)$. La valeur de la fonction est représenté comme le rayon, $r(\vartheta, \varphi) = |Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)|$.

Théorème A.2. d'addition des harmoniques sphériques

Pour $\mathbf{n}, \mathbf{n}' \in \mathbb{S}^2$

$$P_\ell(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\mathbf{n}) \bar{Y}_{\ell m}(\mathbf{n}'). \quad (\text{A.51})$$

Preuve. On rappelle que pour ℓ fixé, l'espace vectoriel généré par les $Y_{\ell m}$, \mathcal{V}_ℓ est invariant sous rotation. Pour une rotation $R \in SO(3)$ donnée il suit alors

$$Y_{\ell m}(R^{-1}\mathbf{n}) = \sum_{m'} Y_{\ell m'}(\mathbf{n}) D_{m'm}^\ell(R). \quad (\text{A.52})$$

Les D^ℓ sont les matrices de la représentation de $U(R)$ sur \mathcal{V}_ℓ . Comme la base $(Y_{\ell m})_{m=-\ell}^{\ell}$ est orthonormée, ces matrices sont unitaires, c'est-à-dire, $D^\ell(D^\ell)^* = \mathbb{1}$, et $D^\ell(R_1 R_2) = D^\ell(R_1) D^\ell(R_2)$. Soit \mathbf{e} le vecteur unitaire en direction z tel que $\mathbf{n} \cdot \mathbf{e} = \cos \vartheta$ pour la direction \mathbf{n} défini par (ϑ, φ) . Nous choisissons R tel que $\mathbf{n}' = R\mathbf{e}$, et donc

$$\begin{aligned} P_\ell(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') &= P_\ell(\mathbf{n} \cdot R\mathbf{e}) = P_\ell(R^{-1}\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell + 1}} Y_{\ell 0}(R^{-1}\mathbf{n}) \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell + 1}} \sum_m Y_{\ell m}(\mathbf{n}) D_{m0}^\ell(R). \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

Maintenant, nous démontrons que

$$D_{m0}^\ell(R) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell + 1}} Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}'). \quad (\text{A.54})$$

Pour voir ceci, on note que

$$\begin{aligned} Y_{\ell m}(\mathbf{n}') &= Y_{\ell m}(R\mathbf{e}) = \sum_{m'} Y_{\ell m'}(\mathbf{e}) D_{m'm}^\ell(R^{-1}) \\ &= \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi}} D_{0m}^\ell(R^{-1}) = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi}} (D_{m0}^\ell(R)). \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

Ici nous avons utilisé que

$$Y_{\ell m}(\mathbf{e}) = \delta_{m0} Y_{\ell 0}(\mathbf{e}) = \delta_{m0} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi}} P_\ell(1) = \delta_{m0} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi}},$$

où nous avons encore utilisé que $P_\ell(1) = 1$. □

A.3 Les polynômes de Laguerre

Nous considérons l'intégrale de contour suivante dans le plan complexe :

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C e^\tau \frac{(\tau - z)^{k-m}}{\tau^{k+1}} d\tau \quad k \geq m. \quad (\text{A.56})$$

où C est un cercle autour de 0 . Ceci est un polynôme de degré $k - m$ en z . Nous écrivons l'énumérateur de la fraction comme

$$(\tau - z)^{k-m} = (-1)^m \frac{(k-m)!}{k!} \left(\frac{d}{dz} \right)^m (\tau - z)^k.$$

Avec ceci, on trouve

$$\frac{1}{2\pi i} \oint e^\tau \frac{(\tau - z)^{k-m}}{\tau^{k+1}} d\tau = (-1)^m \frac{k!}{(k-m)!} \left(\frac{d}{dz} \right)^m \frac{1}{2\pi i} \oint e^\tau \frac{(\tau - z)^k}{\tau^{k+1}} d\tau. \quad (\text{A.57})$$

D'après le théorème de Cauchy, cette intégrale donne

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \oint e^\tau \frac{(\tau - z)^k}{\tau^{k+1}} d\tau &= \frac{1}{k!} \left(\frac{d}{d\tau} \right)^k \Big|_{\tau=0} \underbrace{[e^z (\tau - z)^k]}_{e^z e^{\tau-z} (\tau-z)^k} \\ &= \frac{1}{k!} e^z \left(\frac{d}{dz} \right)^k (e^{-z} z^k). \end{aligned} \quad (\text{A.58})$$

Nous introduisons les polynômes de Laguerre de degré k et d'ordre 0 via

$$L_k(z) \equiv L_k^0(z) = e^z \left(\frac{d}{dz} \right)^k (e^{-z} z^k), \quad (\text{A.59})$$

et les polynôme d'ordre m et de degré $k - m$ via

$$L_{k-m}^m = (-1)^m \left(\frac{d}{dz} \right)^m L_k(z) = \frac{(k-m)!}{2\pi i} \oint e^\tau \frac{(\tau - z)^{k-m}}{\tau^{k+1}} d\tau. \quad (\text{A.60})$$

Nous considérons aussi la fonction génératrice des polynômes de Laguerre,

$$\Phi(z, t) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} L_k(z) \quad (\text{A.61})$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{e^\tau}{\tau} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{t(\tau - z)}{\tau} \right)^k d\tau \quad (\text{A.62})$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{e^\tau}{\tau - t(\tau - z)} d\tau = \frac{e^{-tz/(1-t)}}{1-t}. \quad (\text{A.63})$$

De la même façon, on trouve

$$\Phi_m(z, t) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} L_{k-m}^m(z) \quad (\text{A.64})$$

$$= (-1)^m \frac{\partial^m}{\partial z^m} \Phi(z, t) = \left(\frac{t}{1-t} \right)^m \frac{e^{-tz/(1-t)}}{1-t}. \quad (\text{A.65})$$

Pour la normalisation de la fonction d'onde radiale, nous devons calculer des intégrales de la forme

$$N_{pq}^{mk} \equiv \frac{1}{p!q!} \int_0^{\infty} e^{-x} x^{m+k} L_p^m(x) L_q^m(x) dx. \quad (\text{A.66})$$

En insérant la fonction génératrice ces intégrales deviennent élémentaires. Nous posons

$$f^{mk}(s, t) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{m+k} \Phi_m(x, s) \Phi_m(x, t) dx \quad (\text{A.67})$$

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{s}{1-s} \right)^m \left(\frac{t}{1-t} \right)^m \int_0^{\infty} x^{m+k} \frac{e^{-x(1+t/(1-t)+s/(1-s))}}{(1-t)(1-s)} \\ &= (m+k)! \frac{(st)^m [(1-s)(1-t)]^k}{(1-st)^{m+k+1}} = \sum N_{pq}^{mk} s^p t^q. \end{aligned} \quad (\text{A.68})$$

Pour l'avant dernier signe d'égalité, nous utilisons l'intégrale élémentaire

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}, \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

Notez que pour $k = 0$, $f^{m0}(s, t)$ n'est que une fonction du produit st donc seul les facteurs N_{pp}^{m0} sont non-nuls. Ceci confirme l'orthogonalité (1.149).

Pour la normalisation de la fonction d'onde nous avons besoin du coefficient N_{pp}^{m1} qui est

$$N_{pp}^{m1} = \frac{p!}{(p-m)!} (2p-m+1). \quad (\text{A.69})$$

Avec ceci, et $d^3r = d^3x/a^3$, $a = a_B/Z$, nous trouvons

$$\begin{aligned} a^3 \int_0^{\infty} R^2(r) r^2 dr &= a^3 C_{n\ell}^2 \int_0^{\infty} e^{-2r/n} (2r/n)^{2\ell} r^2 [L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(2r/n)]^2 dr \\ &= a^3 C_{n\ell}^2 (n/2)^3 \int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{2\ell+2} [L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho)]^2 d\rho \\ &= a^3 C_{n\ell}^2 (n/2)^3 [(n+\ell)!]^2 N_{n-\ell-1, n-\ell-1}^{2\ell+1} \\ &= a^3 C_{n\ell}^2 (n/2)^3 \frac{[(n+\ell)!]^3}{(n-\ell-1)!} 2n = 1, \end{aligned} \quad (\text{A.70})$$

et donc sont données par

$$C_{n\ell} = \frac{2}{a^{3/2}n^2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{[(n+\ell)!]^3}}. \quad (\text{A.71})$$

A.4 Groupe, faits élémentaires

Définition A.1. Groupe

Soit G un ensemble et \circ une application

$$\circ : G \times G \rightarrow G : (a, b) \rightarrow a \circ b$$

(une telle application, de $G \times G$ dans G , est appelée une "opération" sur G) avec les propriétés suivantes.

— Pour $a, b, c \in G$ nous avons (**associativité**)

$$(a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c).$$

— Il existe un élément $e \in G$ tel que

$$e \circ a = a \circ e = a \quad \forall a \in G;$$

e est appelé l'**élément neutre** du groupe G .

— Pour tout $a \in G$ il existe un élément $b \in G$ tel que

$$a \circ b = e = b \circ a.$$

Nous appelons b "l'**inverse** de a " et le dénommons $b = a^{-1}$.

Souvent, nous supprimons le signe \circ et nous écrivons simplement $a \circ b \equiv ab$

Exercice A.1.

Montrer que l'inverse est unique.

Montrer que pour tout $a, b \in G$, $(ab)^{-1} = b^{-1}a^{-1}$.

Soient $h, g \in G$. La relation " $h \sim g$ s'il existe un $a \in G$ tel que $h = a^{-1}ga$ " est une relation d'équivalence. La classe d'équivalence d'un élément h , $[h]$, s'appelle la classe de **conjugaison** de h :

$$[h] = \{a^{-1}ha \mid a \in G\}.$$

Définition A.2. Sous-groupe

Un sous-ensemble $H \subset G$ avec $e \in H$ et tel que pour tout $a, b \in H$ nous avons $a \circ b \in H$ et $a^{-1} \in H$, est appelé un **sous-groupe**.

Définition A.3. Ordre

Si un groupe G est fini, le nombre de ses éléments est appelé **l'ordre** du groupe, n_G .

Exercice A.2. L'ordre de tout sous-groupe $H \subset G$ est un diviseur de n_G , c'est-à-dire $n_G/n_H \in \mathbb{N}$.

Indication : montrer que tous les ensembles $Hg \subset G$ pour $g \in G$ sont soit identiques, soit disjoints.

Le quotient $j := \frac{n_G}{n_H}$ s'appelle **l'indice** de H par rapport à G .

Définition A.4. Groupe abélien (commutatif)

Un groupe G avec $a \circ b = b \circ a \quad \forall a, b \in G$ est appelé un **groupe abélien** ou **commutatif**.

Définition A.5. Isomorphisme, homomorphisme

Soient G et G' deux groupes et $\phi : G \rightarrow G'$ une application avec $\phi(a \cdot b) = \phi(a) \cdot \phi(b)$.

- Une telle application est appelée un **homomorphisme**.
- Si ϕ est aussi bijective elle est appelée un **isomorphisme**.
- Si $G \equiv G'$ les homomorphismes sont appelés **endomorphismes** et les isomorphismes sont appelés **automorphismes**.
- Deux groupes G et G' qui admettent un isomorphisme $\phi : G \rightarrow G'$ sont appelés **isomorphes**.

Exercice A.3. L'image de ϕ , $\text{im}(\phi) = \{\phi(a) \mid a \in G\} \subset G'$ est un sous-groupe de G' et le noyau de ϕ , $\text{ker}(\phi) = \{a \in G \mid \phi(a) = e_{G'}\} \subset G$ est un sous-groupe de G pour tout homomorphisme $\phi : G \rightarrow G'$. Montrer qu'un homomorphisme est injectif si et seulement si $\text{ker}(\phi) = \{e_G\}$. Bien sûr un homomorphisme est surjectif si $\text{im}(\phi) = G'$.

Des exemples de groupes infinis bien connus sont

- $(\mathbb{Z}, +)$; $(\mathbb{R}, +)$; $(\mathbb{C}, +)$; $(\mathbb{Q} \setminus \{0\}, \cdot)$; $(\mathbb{R} \setminus \{0\}, \cdot)$; $(\mathbb{C} \setminus \{0\}, \cdot)$.
- Le groupe linéaire général (General linear group) est

$$Gl(n, \mathbb{R}) := \{M \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid \det M \neq 0\}, \quad Gl(n, \mathbb{C}) := \{M \in \mathbb{C}^{n \times n} \mid \det M \neq 0\}.$$
- Le groupe linéaire spécial (Special linear group) est

$$Sl(n, \mathbb{R}) := \{S \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid \det S = 1\}, \quad Sl(n, \mathbb{C}) := \{S \in \mathbb{C}^{n \times n} \mid \det S = 1\}.$$

- Les groupes orthogonaux et unitaires

$$O(n) := \{M \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid M \cdot M^T = \mathbb{I}_n\}, \quad U(n) := \{M \in \mathbb{C}^{n \times n} \mid M \cdot \underbrace{M^*}_{\bar{M}^T} = \mathbb{I}_n\}.$$

- Les groupes orthogonaux et unitaires spéciales :

$$SO(n) := O(n) \cap Sl(n, \mathbb{R}), \quad SU(n) := U(n) \cap Sl(n, \mathbb{C})$$

- Le groupe symplectique

$$Sp(2n) := \{M \in \mathbb{C}^{2n \times 2n} \mid MJM^T = J\}.$$

Ici J est la matrice $2n \times 2n$ anti-symétrique donnée par

$$J = \begin{pmatrix} \mathbb{O}_n & -\mathbb{I}_n \\ \mathbb{I}_n & \mathbb{O}_n \end{pmatrix}.$$

Exemples de groupes finis

- $\{\mathbb{I}, P\}$, $P =$ parité avec $P^2 = \mathbb{I}$.
- $(\mathbb{N}_n, +_n)$ = le groupe des éléments $\{0, 1, 2, \dots, n-1\}$ avec $p +_n q := (p + q, \text{mod } n)$.
- Le groupe de Klein $\{1, i, j, k\}$ avec

$$i^2 = j^2 = k^2 = 1, \quad ij = ji = k, \quad jk = kj = i, \quad ik = ki = j.$$

- Le groupe \mathcal{S}_N des permutations de N éléments.

Exercice A.4. Montrer les énoncés suivants.

- L'ordre de \mathcal{S}_N est $N!$.
- Tout groupe fini est isomorphe à un sous-groupe d'un certain \mathcal{S}_N .
- (\mathbb{N}_q, \dot{q}) le groupe des éléments $\{1, 2, \dots, q-1\}$ pour un nombre premier q avec $m \cdot_n n := (m \cdot n, \text{mod } q)$ forme un groupe. Pourquoi faut-il que q soit un nombre premier ?
- Tous les groupes de deux éléments sont isomorphes.
- Tout groupe fini est défini par son tableau de multiplication. Donner le tableau de multiplication pour $(\mathbb{N}_5, \dot{5})$.
- Construisez un groupe à trois éléments. Connaissez-vous une réalisation simple de ce groupe ? Peut-on construire d'autres groupes de trois éléments ?

A.5 Représentations, faits élémentaires

Définition A.6. Représentation

- Soit V un espace vectoriel (complexe ou réel) et $\text{aut}(V)$ l'ensemble des applications linéaires et bijectives de V en soi-même. Evidemment, $\text{aut}(V)$ forme un groupe.
- Une **représentation** d'un groupe G est un homomorphisme $\varphi : G \rightarrow \text{aut}(V)$.
- Une représentation φ est appelée **irréductible** si les seuls sous-espaces W de V qui sont invariants sous tous les $\varphi(g)$, $g \in G$, c'est-à-dire $\varphi(g)(W) \subset W \quad \forall g \in G$, sont $\{0\}$ et V .

Si V est un espace vectoriel de dimension finie, n , après le choix d'une base dans V , $\text{aut}(V)$ est isomorphe à $\text{Gl}(n, \mathbb{C})$ ou $\text{Gl}(n, \mathbb{R})$ et une représentation est un homomorphisme de G dans les matrices $\text{Gl}(n, \mathbb{C})$. (Comme $\text{Gl}(n, \mathbb{C})$ est un ensemble ouvert dans \mathbb{C}^{n^2} dont il hérite la topologie, $\text{aut}(V)$ est un groupe topologique. (De plus, cet ensemble est localement compact, qui satisfait au deuxième axiome de dénombrabilité.)

Définition A.7. Réductibilité et irréductibilité

- Un sous-ensemble $\Delta \subset \text{aut}(V)$ est appelé **réductible** s'il existe un sous-espace $W \subset V$ non trivial, c'est-à-dire $W \neq \{0\}$ et $W \neq V$, qui est invariant sous tous les automorphismes $A \in \Delta$, c'est-à-dire $AW \subset W$, $\forall A \in \Delta$. Sinon Δ est appelé **irréductible**.
- Un sous-ensemble de matrices $\Delta' \subset \text{Gl}(n, \mathbb{C})$ est appelé **réductible (irréductible)** si les transformations linéaires engendrées sur un espace vectoriel V à dimension n par des matrices dans Δ' après un choix de base sont **réductibles (irréductibles)**. (Vérifier que cette définition est indépendante du choix de base.)
- Un sous-ensemble $\Delta \subset \text{aut}(V)$ est appelé **complètement réductible** s'il existe des sous-espaces V_i , $i \in I$, avec $V = \bigoplus_{i \in I} V_i$ et $AV_i \subset V_i$ pour tout $A \in \Delta$, tel que l'ensemble $\Delta|_{V_i} \subset \text{aut}(V_i)$ défini par $\Delta|_{V_i} = \{A|_{V_i} \mid A \in \Delta\}$ est un ensemble irréductible d'automorphismes sur V_i pour tout $i \in I$. (Ici $A|_{V_i}$ est l'automorphisme A sur le sous-espace V_i .) Dans le cas, de dimension finie de V , ceci implique que les transformations dans Δ sont toutes représentées par des matrices en forme de blocs dans une base adaptée à la décomposition $V = \bigoplus_{i \in I} V_i$ de V .

Proposition A.3.

1. Si $\Delta \subset \text{aut}(V)$ est réductible (irréductible), ceci est aussi vrai pour $A\Delta A^{-1}$ pour n'importe quel $A \in \text{aut}(V)$.
2. Si $\Delta' \subset \text{GL}(n, \mathbb{C})$ est réductible (irréductible) ceci est aussi vrai pour $A\Delta'A^{-1}$ pour n'importe quel $A \in \text{GL}(n, \mathbb{C})$.

Démonstration. Il est clair que le point 2. est un cas particulier du point 1. pour $V = \mathbb{C}^n$. De plus il vérifie que la définition d'un ensemble réductible (irréductible) de matrices ne dépend pas de la base choisie.

Cependant, 1. est évident parce que W est un espace invariant sous Δ si et seulement. si $A \cdot W$ est un espace invariant sous $A\Delta A^{-1}$. \square

Lemme A.3. (de Schur)

Soient Σ et Δ deux ensembles irréductibles de matrices, $\Sigma \subset \text{GL}(n, \mathbb{C})$, $\Delta \subset \text{GL}(m, \mathbb{C})$. Soit $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$ telle que

$$\Sigma \cdot A = A \cdot \Delta.$$

Alors nous avons soit $A \equiv 0$ soit $m = n$ et A est inversible, $A \in \text{GL}(n, \mathbb{C})$.

Démonstration.

Soit $A = (a_{ij})$ et $S \in \Sigma$, $R \in \Delta$ tels que $SA = AR$. C'est-à-dire,

$$\sum_{i=1}^n S_{li} a_{ij} = \sum_{k=1}^m a_{lk} R_{kj}. \tag{A.72}$$

Soit $a_k \in \mathbb{C}^n$ le vecteur avec les composantes

$$a_k = \begin{pmatrix} a_{1k} \\ a_{2k} \\ \dots \\ a_{nk} \end{pmatrix}$$

Avec ceci nous pouvons écrire (A.72) en écriture vectorielle,

$$Sa_j = \sum_m R_{mj} a_m.$$

Alors Sa_j est une combinaison linéaire des vecteurs a_k . Les matrices dans Σ laissent donc invariant l'espace linéaire généré par les vecteurs $\{a_1, \dots, a_m\}$. Nous appelons cet espace V . Comme Σ est irréductible on a que $\dim V = 0$ ou $\dim V = n$.

Dans le premier cas, $A \equiv 0$.

Dans le deuxième cas, les m vecteurs a_k génèrent un espace de dimension n , alors $n \leq m$.

Il est facile de voir que Σ (et Δ) sont irréductibles si et seulement si Σ^T et Δ^T le sont. De plus, si nous appliquons le même argument sur $\Delta^T A^T = A^T \Sigma^T$, nous trouvons que $n \geq m$.

Alors $n = m$. Nous avons donc $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ et les n colonnes de A engendrent un espace vectoriel de dimension n , alors A est inversible. \square

Corollaire A.2. *Soit $\Delta \subset \text{Gl}(n, \mathbb{C})$ un ensemble irréductible et $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ commute avec tous les matrices dans Δ . Alors $B = \lambda \mathbb{I}$ pour un $\lambda \in \mathbb{C}$.*

Démonstration. Nous considérons $A = B - \lambda \mathbb{I}$ où λ est une valeur propre de la matrice B . Alors A n'est pas inversible. Cependant, $A\Delta = \Delta A$, donc $A \equiv 0$, c'est-à-dire $B = \lambda \mathbb{I}$. \square

Corollaire A.3. *Soit $\Delta \subset \text{Gl}(n, \mathbb{C})$ irréductible et tous les éléments dans Δ commutent entre eux. Dans ce cas $n = 1$.*

Démonstration. D'après le corollaire A.2 les éléments de Δ sont tous de la forme $\lambda \mathbb{I}$. Ceci est irréductible seulement si $n = 1$. \square

Nous considérons maintenant des espaces vectoriels (complexes) munis d'un produit scalaire.

Si nous choisissons une **base orthonormée**, une **transformation unitaire** d'un espace vectoriel de dimension n correspond à une matrice unitaire, $A \in \mathcal{U}(n)$.

Définition A.8. Produit scalaire

Un produit scalaire sur un espace vectoriel (complexe) est une application

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{C} : (v, w) \mapsto \langle v, w \rangle$$

qui est linéaire dans le deuxième argument et anti-linéaire dans le premier. C'est-à-dire

$$\begin{aligned} \langle \alpha v_1 + v_2, w \rangle &= \bar{\alpha} \langle v_1, w \rangle + \langle v_2, w \rangle \quad \text{et} \\ \langle v, \alpha w_1 + w_2 \rangle &= \alpha \langle v, w_1 \rangle + \langle v, w_2 \rangle \end{aligned}$$

Définition A.9. Unitaire, Orthonormée

— *Soit V un espace vectoriel complexe muni d'un produit scalaire. Un automorphisme $\varphi \in \text{aut}(V)$ est appelé unitaire si*

$$\langle \varphi(v), \varphi(w) \rangle = \langle v, w \rangle \quad \forall v, w \in V.$$

— Une base (e_j) de V est appelée orthonormée si $\langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}$.

Proposition A.4. Soit V un espace linéaire complexe de dimension n muni d'un produit scalaire. Après un choix de base orthonormée toute transformation unitaire de V correspond à une matrice unitaire $A \in \mathcal{U}(n)$ et vice-versa.

Démonstration. Soit $(e_i)_{i=1}^n$ une base orthonormée donnée.

$e_j \mapsto \sum_{\ell} A_{\ell j} e_{\ell}$ définit une application linéaire sur V et toute application linéaire peut s'écrire de cette forme.

La condition d'unitarité est alors

$$\left\langle \sum_{\ell} A_{\ell j} e_{\ell}, \sum_m A_{mi} e_m \right\rangle = \delta_{ji}.$$

Linéarité dans le deuxième et anti-linéarité dans le premier argument donne

$$\delta_{ji} = \sum_{\ell, m} \bar{A}_{\ell j} A_{mi} \underbrace{\langle e_{\ell}, e_m \rangle}_{\delta_{\ell m}} = \sum_{\ell} \bar{A}_{\ell j} A_{\ell i} = \sum_{\ell} A_{j\ell}^* A_{\ell i} = (A^* A)_{ji}.$$

Alors $A^* \cdot A = \mathbb{I}$ et comme A est inversible, ceci implique $A^{-1} = A^*$, c'est-à-dire A est unitaire. \square

Proposition A.5. Soit $A : V \rightarrow V$ une transformation unitaire qui laisse invariant un sous espace $S \subset V$. Alors A laisse invariant aussi son complément orthogonal, S^{\perp} .

Démonstration. Le complément orthogonal d'un sous-espace S est donné par $S^{\perp} = \{x \in V \mid \langle x, y \rangle = 0 \ \forall y \in S\}$. Soit alors $x \in S^{\perp}$ et $y \in S$. Nous voulons montrer que $Ax \in S^{\perp}$. Comme A laisse S invariant, on peut le considérer comme un automorphisme sur S . Il existe donc un $z \in S$ avec $Az = y$. Avec ceci on trouve

$$\langle Ax, y \rangle = \langle Ax, Az \rangle = \langle x, z \rangle = 0,$$

ce qui implique $Ax \in S^{\perp} \ \forall x \in S^{\perp}$. \square

Comme $V = S \oplus S^{\perp}$ nous pouvons alors choisir une base orthonormée (premiers j élément dans S , derniers $n - j$ éléments dans S^{\perp}) telle que A correspond à une matrice D de la forme

$$D = \begin{pmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix},$$

où D_1 et D_2 sont des matrices unitaires de dimension j et $n - j$ respectivement.

Considérons alors la représentation d'un groupe G par des **automorphismes unitaire** d'un espace vectoriel complexe V de dimension finie n ,

$$\phi : G \rightarrow \text{Uni}(V) : a \mapsto \phi(a).$$

Après le choix d'une base orthonormée, ceci correspond à la représentation par des matrices unitaires, $\phi(a) \in \mathcal{U}(n)$. Supposons que $S \subset V$ soit un espace invariant sous cette représentation. Donc pour tout $a \in G$, et $x \in S$ aussi $\phi(a)x \in S$. D'après ce que nous avons dit donc aussi S^\perp est invariant et nous pouvons 'réduire' notre représentations à deux pièces, un sur S et un sur S^\perp , tel que les matrices $\phi(a) \in \mathcal{U}(n)$ prennent la forme

$$\phi(a) = \begin{pmatrix} \phi_1(a) & 0 \\ 0 & \phi_2(a) \end{pmatrix},$$

où $\phi_1(a)$ et $\phi_2(a)$ sont des matrices unitaires de dimension $\dim(S)$ et $n - \dim(S)$ respectivement. En plus, ϕ_1 est une représentation du groupe G sur S et ϕ_2 en est une sur S^\perp . Mais aussi S et S^\perp sont des espaces vectoriel complexe de dimension finie et nous pouvons réduire notre représentation aussi sur S et S^\perp et ainsi de suite jusqu'à ce que nous arrivons à des sous espaces irréductibles. Donc une telle **représentation unitaire** sur un espace de dimension finie est toujours **complètement réductible**. Si G est un groupe compact, ceci est aussi vrai si V est de dimension infinie.

A.6 Groupes de Lie, algèbres de Lie

Un traitement plus mathématique et plus complet de ce sujet se trouve par exemple dans [15, 7] et, d'un point de vue plus physique dans [14].

Définition A.2. Groupe de Lie

Un groupe de Lie est un sous-groupe de $Gl(n, \mathbb{C})$ qui forme un sous-ensemble fermé de $Gl(n, \mathbb{C}) \subset \mathbb{R}^{2n^2}$.

Notez que $Gl(n, \mathbb{C})$ est en effet un sous-ensemble ouvert de \mathbb{R}^{2n^2} .

Nous dénommons par a_{jk} les coefficients d'une matrice A , $A = (a_{jk})$, $a_{jk} \in \mathbb{C}$. Tout groupe, qui peut être défini comme

$$G = \{A \in Gl(n, \mathbb{C}) | a_{jk} = x_{jk} + iy_{jk}, \text{ et } P_\ell(x_{11}, \dots, y_{nn}) = 0 \quad \forall 1 \leq \ell \leq N \leq 2n^2\}, \quad (\text{A.73})$$

avec des polynômes réels P_ℓ de rang maximal² forme un groupe de Lie. La dimension (réelle) de G est $2n^2 - N$. Ceci veut dire que localement G peut être décrit par $2n^2 - N$ paramètres réels. Par la suite, nous ne considérons que des groupes de Lie de cette forme.

Ceci n'est pas la forme la plus générale mais elle contient tout ce dont nous avons besoin dans ce cours. Par exemple tous les groupes continus décrits dans le paragraphe A.4 sont de cette forme.

Exercice : Trouvez des polynômes P_ℓ et la dimension des groupes $SO(3)$, $SU(2)$, $Sl(n, \mathbb{C})$ et $Sl(n, \mathbb{R})$.

Définition A.3. Sous-groupe à un paramètre :

Un sous-groupe d'un groupe de Lie G qui est de la forme $\{A(t) \in G \mid t \in \mathbb{R}\}$ avec la propriété $A(t)A(s) = A(t+s)$, et tel que les coefficients $a_{jk}(t)$ sont des fonctions différentiables en t , s'appelle un sous-groupe à un paramètre.

Evidemment, $A(t)A(0) = A(t) \forall t$, donc $A(0) = \mathbb{I}$ et $A(-t) = A(t)^{-1}$.

Proposition A.6. Soient les $A(t) \in G$, $t \in \mathbb{R}$ un sous-groupe à un paramètre, alors ils satisfont une équation différentielle de la forme

$$\dot{A} = MA, \tag{A.74}$$

avec solution

$$A(t) = \exp(Mt) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} M^n. \tag{A.75}$$

Preuve.

$$\dot{A}(t) = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} (A(s+t) - A(t)) = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} (A(s) - \mathbb{I})A(t) = MA(t), \tag{A.76}$$

où nous avons introduit la matrice M donnée par

$$M_{jk} = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{a_{jk}(s) - \delta_{jk}}{s} = \dot{a}_{jk}(0). \tag{A.77}$$

La matrice M est bien définie car les a_{jk} sont différentiables.

Evidemment $B(t) = \exp(Mt)$ résout l'équation différentielle (A.74) avec condition initiale $B(0) = \mathbb{I}$. Cependant, la solution d'une éq.-diff. est unique ce qui implique $B(t) = A(t)$. \square

2. Un ensemble de N polynômes est dit 'de rang maximal' si le rang de la matrice $(\partial_j P_k(\mathbf{x})) \in \mathbb{R}^{2n^2 \times N}$ est maximal pour tout \mathbf{x} avec $P_\ell(\mathbf{x}) = 0 \forall 1 \leq \ell \leq N$, dans notre cas ceci dit qu'il est N .

La preuve et l'équation (A.74) nous donne aussi

$$M = \dot{A}(t) \Big|_{t=0}. \quad (\text{A.78})$$

Définition A.4. Soit G un groupe de Lie. Les matrices M qui sont de la forme (A.78) pour un groupe à un paramètre dans G forment l'algèbre de Lie de G dénommée \mathcal{G} .

Proposition A.7. Soit $G \subset \mathbb{R}^{2n^2}$ un groupe de Lie de dimension (réelle) m . Alors son algèbre de Lie est un espace vectoriel $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^{2n^2}$ de dimension (réelle) m .

Preuve. Soit G défini par les polynômes P_ℓ , $1 \leq \ell \leq 2n^2 - m = N$. Soit $M \in \mathcal{G}$ et $A(t) = (a_{jk}(t))$ le sous-groupe à un paramètre de G avec $M = \dot{A}(t) \Big|_{t=0}$. Nous posons $P_\ell(t) = P_\ell(A(t))$ donc $P_\ell(t) \equiv 0$. Nous prenons la dérivée par rapport à t ce qui donne

$$0 = \dot{P}_\ell \Big|_{t=0} = \sum_{jk} \frac{\partial P_\ell}{\partial a_{jk}} \Big|_{a_{jk}=\delta_{jk}} \cdot \dot{a}_{jk} \Big|_{t=0} = \sum_{jk} \frac{\partial P_\ell}{\partial a_{jk}} \Big|_{a_{jk}=\delta_{jk}} \cdot M_{jk}. \quad (\text{A.79})$$

Ceci donne N équations linéaires dans les composantes M_{jk} , qui sont indépendantes parce que les pré-facteurs $(\partial P_\ell / \partial a_{jk})(\mathbb{I})$ ont rang maximal. L'espace de toutes les matrices M qui satisfont (A.79) est donc un espace linéaire de dimension $2n^2 - N = m$.

Proposition A.8. Soit \mathcal{G} l'algèbre de Lie du groupe de Lie G . Si les matrices $M, N \in \mathcal{G}$, aussi leur commutateur, $[M, N] = MN - NM \in \mathcal{G}$.

Preuve. Soit $A(t) = \exp(tM)$. Nous démontrons d'abord que pour tout $N \in \mathcal{G}$, $S(t) = A(t)NA(-t) \in \mathcal{G} \forall t \in \mathbb{R}$. Pour démontrer ceci nous considérons un t fixé et

$$C_t(s) = A(t) \exp(sN) A(-t). \quad (\text{A.80})$$

Evidemment $C_t(s) \in G \forall t, s \in \mathbb{R}$ et il peut être considéré comme groupe à un paramètre s pour un t fixé. Donc

$$\mathcal{G} \ni \frac{d}{ds} C_t(s) \Big|_{s=0} = A(t)NA(-t).$$

Nous utilisons ceci et la formule de Baker-Hausdorff. Comme \mathcal{G} est un espace linéaire, pour toute courbe différentiable $S(t)$ dans \mathcal{G} on a aussi $\frac{d}{dt} S(t) \in \mathcal{G}$.

Nous appliquons ceci à la courbe $S(t) = e^{tM}Ne^{-tM}$ quand $t = 0$. D'après Baker-Hausdorff³

$$e^{tM}Ne^{-tM} = N + t[M, N] + \mathcal{O}(t^2), \quad (\text{A.81})$$

$$\text{et donc } \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} (e^{tM}Ne^{-tM}) = [M, N] \in \mathcal{G}. \quad (\text{A.82})$$

□

Alors avec tout $M, N \in \mathcal{G}$ le commutateur est aussi dans \mathcal{G} , $[M, N] \in \mathcal{G}$. Il est facile de vérifier que le commutateur de deux matrices satisfait à **l'identité de Jacobi**,

$$[[X, Y], Z] + [[Y, Z], X] + [[Z, X], Y] = 0 \quad \forall X, Y, Z \in \mathcal{G}. \quad (\text{A.83})$$

Un espace vectoriel avec un produit anti-symétrique qui satisfait l'identité de Jacobi est appelé une algèbre de Lie. Pas toute algèbre de Lie provient d'un groupe de Lie, mais dans ce cours c'est celles qui nous intéressent.

Exemples

- Soit $G = Gl(n, \mathbb{C})$. Son algèbre de Lie est dénommée $gl(n, \mathbb{C})$. Alors

$$gl(n, \mathbb{C}) = \{M \in \mathbb{C}^{n \times n} \mid \det \exp(M) = \exp(\text{tr}M) \neq 0\}.$$

Par contre, $\exp(z) = 0$ n'a pas de solution, donc ceci implique que

$$gl(n, \mathbb{C}) = \mathbb{C}^{n \times n}.$$

De même pour $G = Gl(n, \mathbb{R})$ on trouve $gl(n, \mathbb{R}) = \mathbb{R}^{n \times n}$.

- Soit $G = Sl(n, \mathbb{C})$. Son algèbre de Lie est dénommée $sl(n, \mathbb{C})$. Alors

$$sl(n, \mathbb{C}) = \{M \in \mathbb{C}^{n \times n} \mid \det \exp(M) = \exp(\text{tr}M) = 1\} \text{ donc } \text{tr}M = 0.$$

$$sl(n, \mathbb{C}) = \{M \in \mathbb{C}^{n \times n} \mid \text{tr}M = 0\}.$$

De même pour $G = Sl(n, \mathbb{R})$ on trouve

$$sl(n, \mathbb{R}) = \{M \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid \text{tr}M = 0\}.$$

3. Ici nous ne démontrons pas la formule de Baker-Hausdorff, mais les deux termes que nous avons besoin sont obtenus aussi directement en effectuant la première dérivée sur la série de $S(t)$.

- Soit $G = U(n)$. Son algèbre de Lie est dénommée $u(n)$.
Pour $A(t) = \exp(tM) \in U(n)$ nous avons

$$A(t)A^*(t) = \exp(tM) \exp(tM^*) = \mathbb{I},$$

et donc

$$0 = \frac{d}{dt} (\exp(tM) \exp(tM^*))_{t=0} = M + M^*.$$

Nous trouvons alors que $u(n)$ sont les matrices anti-hermitiennes,

$$u(n) = \{M \in \mathbb{C}^{n \times n} \mid M + M^* = 0\}.$$

Pour $SU(n) = Sl(n, \mathbb{C}) \cap U(n)$ et son algèbre de Lie $su(n)$ ceci implique

$$su(n) = \{M \in \mathbb{C}^{n \times n} \mid \text{tr}M = 0, M + M^* = 0\}.$$

- On trouve aussi facilement $so(n)$, l'algèbre de Lie de $SO(n)$, qui est donnée par les matrices réelles anti-symétriques.

$$so(n) = \{M \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid M + M^T = 0\}.$$

Exercice : Déterminer la dimension des groupes de Lie / algèbres de Lie de ces exemples.

Nous voulons encore définir les représentations induites sur l'algèbre de Lie. Soit

$$U : G \rightarrow \text{aut}(E) : A \mapsto U(A) \quad (\text{A.84})$$

une représentation du groupe de Lie G sur les automorphismes de l'espace vectoriel E de dimension finie. Pour un élément $M \in \mathcal{G}$ de l'algèbre de Lie nous définissons la représentation induite sur \mathcal{G} par

$$U_* : \mathcal{G} \rightarrow \text{hom}(E) : M \mapsto U_*(M) = \left. \frac{d}{dt} U(\exp(tM)) \right|_{t=0}. \quad (\text{A.85})$$

Si nous formons le groupe à un paramètre $\exp(tU_*(M))$, la dérivation par rapport à t donne

$$\left. \frac{d}{dt} \exp(tU_*(M)) \right|_{t=0} = U_*(M) \quad \text{donc} \quad \exp(tU_*(M)) = U(\exp(tM)). \quad (\text{A.86})$$

Proposition A.9. $U_* : \mathcal{G} \rightarrow \text{hom}(E)$ est linéaire et conserve le commutateur, $U_*(M + N) = U_*(N) + U_*(M)$ et $U_*([M, N]) = [U_*(M), U_*(N)]$.

Preuve. Par définition de U_* , $U_*(M+N)$ est le générateur de $U(\exp(t(M+N)))$. Cependant, l'expansion jusqu'au premier ordre en t donne

$$\begin{aligned} U_*(M+N) &= \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} U(\exp(t(M+N))) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} [\mathbb{I} + t(U_*(M) + U_*(N)) + \mathcal{O}(t^2)] \\ &= U_*(M) + U_*(N). \end{aligned}$$

Pour le commutateur nous utilisons (A.86). Ceci implique

$$\begin{aligned} U_*(e^{tM} N e^{-tM}) &= e^{tU_*(M)} U_*(N) e^{-tU_*(M)} \quad \text{et donc} \\ \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} e^{tU_*(M)} U_*(N) e^{-tU_*(M)} &= [U_*(M), U_*(N)]. \end{aligned}$$

Par contre, comme U_* est linéaire il commute avec la différentiation, et $\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} e^{tM} N e^{-tM} = [M, N]$ implique alors

$$[U_*(M), U_*(N)] = U_*([M, N]).$$

□

Bibliographie

- [1] D. Bohm, Phys. Rev. **85**, 166, 180 (1952).
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique Quantique, Tome I & II, Hermann, Paris (1977).
- [3] A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, Phys. Rev **47**, 777 (1935).
- [4] Y. Fein et al., Nature Physics, **15**, 1242–1245 (2019)
- [5] D.J. Griffith, Introduction to Quantum Mechanics, Pearson, Harlow (2014)
- [6] W. Heisenberg, Physik und Philosophie, Hirzel Verlag, Stuttgart (2000).
- [7] A. Kirillov, An Introduction to Lie Groups and Lie Algebras, Cambridge (2017).
- [8] L.D. Landau et E.M. Lifchitz, Mécanique Quantique (Physique Théorique, Tome 3), Editions Mir (1988).
- [9] A. Messiah, Mécanique Quantique, tome 1 & 2, Dunod, Paris (1995).
- [10] Michael Reed and Barry Simon, Methods in Modern Mathematical Physics, Academic Press (1981).
- [11] W. Rudin, Functional analysis, McGraw-Hill (1991).
- [12] J.J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Pearson, Harlow (1993).
- [13] D. J. Simms, Lie Groups and Quantum Mechanics, Springer Lecture Notes in Mathematics, 52 (1968). bibitemSimon Barry Simon, Quantum Dynamics, From Automorphisms to Hamiltonians, Princeton University Press 327 (1976).
- [14] N. Straumann, Quantenmechanik : Nichtrelativistische Quantentheorie, Springer Verlag, Berlin (2002).
- [15] N. Varadarajan, Lie Groups, Lie Algebras and their Representations, Prentice-Hall, Englewood Cliffs (1974).