

Première partie

Systemes de Bosons et de Fermions

Chapitre 1

Particules identiques en mécanique quantique

La mécanique quantique repose sur une série d'axiomes comme la structure hilbertienne de l'espace des états, l'équation de Schrödinger pour décrire l'évolution temporelle d'un système ou encore le principe de "réduction du paquet d'onde" pour décrire le résultat d'une mesure. Ces axiomes sont suffisants pour traiter un problème à une particule ou à N particules distinctes, mais s'avèrent incomplets pour les situations où plusieurs particules identiques sont en jeu.

Un exemple simple de cette insuffisance est le choc élastique entre deux particules que nous numérotions 1 et 2 (figure (1.1)). Plaçons-nous pour simplifier dans le référentiel du centre de masse, les deux particules ayant initialement les impulsions \mathbf{p}_i et $-\mathbf{p}_i$. Après le choc, déterminons la probabilité de mesurer une particule avec l'impulsion \mathbf{p}_f et l'autre avec l'impulsion $-\mathbf{p}_f$ (on a bien sûr $|\mathbf{p}_f| = |\mathbf{p}_i|$). Si les deux particules sont discernables, ce résultat de mesure peut correspondre à l'un des deux états finals :

$$|1 : \mathbf{p}_f, 2 : -\mathbf{p}_f\rangle \quad |1 : -\mathbf{p}_f, 2 : \mathbf{p}_f\rangle \quad (1.1)$$

et la probabilité pour obtenir cette détection simultanée est la somme des probabilités correspondant à des états finals orthogonaux :

$$P = |\mathcal{A}(\mathbf{p}_i \rightarrow \mathbf{p}_f, -\mathbf{p}_i \rightarrow -\vec{p}_f)|^2 + |\mathcal{A}(\mathbf{p}_i \rightarrow -\mathbf{p}_f, -\mathbf{p}_i \rightarrow \mathbf{p}_f)|^2 \quad (1.2)$$

où $\mathcal{A}(\mathbf{p}_i \rightarrow \mathbf{p}, -\mathbf{p}_i \rightarrow -\mathbf{p})$ désigne l'amplitude de probabilité, nombre *a priori* complexe, pour un processus donné. En revanche, si les particules sont indiscernables, la distinction entre les deux états (1.1) n'a pas de sens. Il s'agit du même état physique final, puisque par définition de l'indiscernabilité, il n'y a pas moyen de les distinguer. Que doit-on faire dans ce cas ? Ajouter les amplitudes de probabilité, les soustraire, ajouter les probabilités ? Remarquons que ce problème est typiquement quantique. Si les particules sont classiques, on peut toujours identifier les trajectoires, et connaître l'origine de la particule détectée. Notons aussi que le problème ne se pose que si toutes les caractéristiques des deux particules sont les mêmes : même masse, même charge, même spin, ... Deux électrons sont identiques. En revanche, un électron et un positron ne seront jamais traités comme identiques, même dans un problème où la charge n'intervient pas. Il est en effet toujours possible d'imaginer une expérience dans laquelle on mesurerait cette charge et on déterminerait les chemins suivis respectivement par l'électron et le positron ; on peut donc appliquer dans ce cas la formule (1.2).

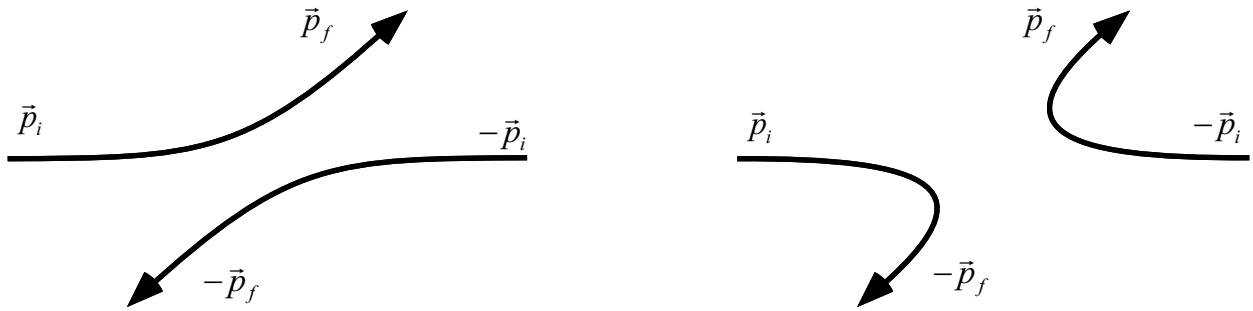


FIG. 1.1 – Choc entre deux particules identiques dans le référentiel du centre de masse

1.1 Le postulat de symétrisation

1.1.1 Énoncé

On numérote les particules du système de 1 à N et on introduit les opérateurs transposition P_{ij} qui échangent les états de la particule i et de la particule j ; par exemple, pour des particules sans spin, on a :

$$P_{ij}\Psi(\dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots) = \Psi(\dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots) \quad (1.3)$$

Pour remédier au problème soulevé ci-dessus, on ajoute aux axiomes de la Mécanique Quantique le postulat suivant :

Si un système comprend plusieurs particules identiques, les seuls vecteurs d'état acceptables sont ceux qui sont :

- symétriques, pour des particules de type *Boson*,
- anti-symétriques, pour des particules de type *Fermion*,

quand on fait agir l'opérateur transposition P_{ij} de deux particules quelconques i et j , soit

$$P_{ij}|\Psi\rangle = \epsilon|\Psi\rangle \quad (1.4)$$

où $\epsilon = 1$ pour des bosons, et $\epsilon = -1$ pour des fermions.

1.1.2 Remarques

Le théorème spin–statistique

Ce théorème¹ fait appel d'une manière qui semble incontournable à la théorie quantique relativiste des champs² et établit le résultat suivant : les particules de spin entier ($S = 0, 1, 2, \dots$) sont des bosons et les particules de spin demi-entier ($S = 1/2, 3/2, \dots$) sont des fermions. Ce résultat n'a jamais été mis en défaut expérimentalement, mais cela ne doit pas empêcher un expérimentateur imaginatif de chercher des violations.

¹W. Pauli, Phys. Rev. **58**, 716 (1940).

²Voir à ce sujet le texte très intéressant de R.P. Feynman dans *Les particules et les lois de la physique*, R.P. Feynman et S. Weinberg, Paris, Interéditions (1989), ainsi que le livre consacré aux diverses preuves de ce théorème : *Pauli and the Spin-Statistics Theorem*, I. Duck and E.C.G. Sudarshan, (World Scientific, 1997).

Particules composites

Si les énergies en jeu dans une expérience donnée sont suffisamment basses pour que l'on n'aille pas sonder la structure composite de cette particule, on peut classer cette particule comme boson ou fermion suivant son spin total. En voici quelques exemples :

- Le proton et le neutron, composés de trois quarks de spin 1/2, et eux-mêmes de spin 1/2, sont des fermions.
- La particule α , composée de deux protons et de deux neutrons, et de spin nul, est un boson.
- L'atome d'hydrogène, proton+électron est un boson. Son état fondamental est clivé en deux sous-niveaux, respectivement de spin 0 et de spin 1 (raie à 21 cm).
- L'hélium 3 ($2e + 2p + 1n$) est un fermion, alors que l'hélium 4 ($2e + 2p + 2n$) est un boson. Ces deux atomes, alors qu'ils sont chimiquement équivalents, ont des comportements très différents à basse température, en raison de leurs natures statistiques opposées. Par exemple, l'hélium 4 devient superfluide en dessous de 2.18 Kelvins, alors que le liquide hélium 3 reste normal, sauf à très basse température (milliKelvin).
- Plus généralement, pour des atomes neutres, c'est le nombre de neutrons dans le noyau qui décide du caractère bosonique ou fermionique, puisque les nombres d'électrons et de protons sont égaux.
- Dans un matériau supraconducteur, les électrons peuvent s'apparier pour former des *paires de Cooper*, que l'on peut traiter comme des bosons.

1.1.3 Compatibilité avec l'équation de Schrödinger

Le but de paragraphe est de montrer la propriété essentielle suivante : si l'on part d'un vecteur d'état complètement symétrique ou anti-symétrique et si on le laisse évoluer sous l'action de l'hamiltonien du système, la symétrisation est préservée.

Un opérateur transposition P_{ij} quelconque commute nécessairement avec l'hamiltonien. Si ce n'était pas le cas, il existerait un moyen de distinguer les particules correspondantes. Intégrons maintenant pas à pas l'équation de Schrödinger. Si on dispose d'un vecteur d'état à l'instant t que l'on suppose symétrique ou anti-symétrique, le vecteur d'état à l'instant $t + dt$ s'écrit :

$$|\psi(t + dt)\rangle = \left(1 - i\frac{H dt}{\hbar}\right) |\psi(t)\rangle \quad (1.5)$$

On a alors

$$\begin{aligned} P_{ij}|\psi(t + dt)\rangle &= \left(1 - i\frac{H dt}{\hbar}\right) P_{ij}|\psi(t)\rangle \\ &= \left(1 - i\frac{H dt}{\hbar}\right) \epsilon|\psi(t)\rangle \\ &= \epsilon|\psi(t + dt)\rangle \end{aligned} \quad (1.6)$$

Un vecteur d'état initialement symétrique ou anti-symétrique garde donc cette propriété durant l'évolution hamiltonienne.

1.2 Construction d'une base de fonction d'onde

Pour un système à N particules discernables, l'espace des états est engendré à partir d'une base de l'espace des états à une particule $\mathcal{B} = \{|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \dots\}$ en utilisant les vecteurs :

$$|1 : \alpha_1; 2 : \alpha_2; \dots; N : \alpha_N\rangle \quad (1.7)$$

Si l'espace à une particule est de dimension finie d , l'espace des états pour N particules discernables a une dimension d^N . Pour des particules identiques, le postulat de symétrisation réduit considérablement la dimension du sous-espace physiquement acceptable. Le but de cette section est de construire explicitement une base de ce sous-espace³.

1.2.1 Cas de deux particules identiques

Commençons par le cas simple de deux particules numérotées 1 et 2. Pour des bosons, les vecteurs d'états acceptables sont :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1 : \alpha; 2 : \beta\rangle + |1 : \beta; 2 : \alpha\rangle) \quad \text{pour } \alpha \perp \beta \quad (1.8)$$

ou alors :

$$|\psi\rangle = |1 : \alpha; 2 : \alpha\rangle \quad (1.9)$$

Pour des fermions, on doit prendre :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1 : \alpha; 2 : \beta\rangle - |1 : \beta; 2 : \alpha\rangle) \quad (1.10)$$

et on a toujours $\alpha \neq \beta$ puisque le vecteur ci-dessus serait nul sinon. Ceci constitue un exemple du principe d'exclusion de Pauli : deux fermions identiques ne peuvent être dans le même état quantique.

Un cas particulier intéressant concerne le cas de deux particules de spin 1/2 pour lesquelles on cherche un vecteur d'état total sous la forme :

$$|\psi\rangle = |\psi_{\text{espace}}\rangle \otimes |\psi_{\text{spin}}\rangle \quad (1.11)$$

Cette forme est utile pour tous les problèmes non relativistes pour lesquels il n'y a pas de mélange entre les variables d'espace et les variables de spin. On peut alors chercher une base formée par :

1. une fonction d'espace symétrique et une fonction de spin anti-symétrique,
2. une fonction d'espace anti-symétrique et une fonction de spin symétrique.

Notons χ_a et χ_b les deux fonctions d'espace.

– Si $\chi_a = \chi_b$, alors la fonction d'espace est symétrique et le vecteur d'état total est :

$$|\psi\rangle = |1 : \chi_a; 2 : \chi_a\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|1 : +; 2 : -\rangle - |1 : -; 2 : +\rangle) \quad (1.12)$$

On passe donc d'un sous-espace de dégénérescence 4 en l'absence de postulat de symétrisation, à un sous-espace de dimension 1 du fait de ce postulat. Le spin total est 0, puisque la fonction de spin correspond à l'état singulet.

³Cette section reprend la présentation et les notations de Mécanique Quantique II, chapitre XIV, C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë.

- Si $\chi_a \perp \chi_b$, alors les deux possibilités présentées ci-dessus sont autorisées. On trouve l'état singulet :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1 : \chi_a; 2 : \chi_b\rangle + |1 : \chi_b; 2 : \chi_a\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|1 : +; 2 : -\rangle - |1 : -; 2 : +\rangle) \quad (1.13)$$

et les trois états triplets :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1 : \chi_a; 2 : \chi_b\rangle - |1 : \chi_b; 2 : \chi_a\rangle) \otimes \begin{cases} |1 : +; 2 : +\rangle \\ (|1 : +; 2 : -\rangle + |1 : -; 2 : +\rangle)/\sqrt{2} \\ |1 : -; 2 : -\rangle \end{cases} \quad (1.14)$$

Dans ce cas, le postulat de symétrisation fait passer d'un sous-espace des états dégénéré 8 fois à un sous-espace de dégénérescence 4.

On voit clairement sur cet exemple que le rôle du postulat de symétrisation est d'interdire certains états qui auraient été physiquement acceptables pour des particules discernables. En aucun cas, ce postulat n'est responsable d'une interaction entre particules. On lit parfois que "des fermions se repoussent" et que "des bosons s'attirent". Ceci est une formulation rapide pour un effet subtil lié précisément à cette restriction de l'espace des états accessibles. Nous en verrons un exemple dans le paragraphe 1.3.2.

1.2.2 Cas de N particules identiques

Le groupe symétrique

La construction de l'espace des états accessibles fait appel au groupe symétrique, c'est-à-dire le groupe des bijections d'un ensemble à N éléments sur lui-même. Rappelons donc tout d'abord les propriétés essentielles de ce groupe⁴.

1. Ce groupe a $N!$ éléments, appelés permutations.
2. Toute permutation peut s'écrire comme un produit de transpositions τ_{ij} :

$$\tau_{ij}(i) = j \quad \tau_{ij}(j) = i \quad \tau_{ij}(k) = k \text{ si } k \neq i, j \quad (1.15)$$

Par exemple, le cycle $\sigma : 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$ peut s'écrire : $\sigma = \tau_{23}\tau_{13}$.

3. On peut associer à toute permutation σ un nombre $\epsilon_\sigma = \pm 1$, appelé signature de la permutation, tel que :

$$\epsilon_{\sigma\sigma'} = \epsilon_\sigma \epsilon_{\sigma'} \quad (1.16)$$

La signature de l'identité est 1, et la signature de toute transposition est -1 .

Considérons l'espace de Hilbert décrivant un ensemble de N particules. On définit alors dans cet espace $N!$ opérateurs P_σ par :

$$P_\sigma |1 : \alpha_1; 2 : \alpha_2; \dots; N : \alpha_N\rangle = |1 : \alpha_{\sigma(1)}; 2 : \alpha_{\sigma(2)}; \dots; N : \alpha_{\sigma(N)}\rangle \quad (1.17)$$

On se convaincra aisément que ces opérateurs permutations sont unitaires (généralement pas hermitiens) et qu'ils vérifient $P_\sigma P_{\sigma'} = P_{\sigma'\sigma}$. Cette définition généralise à toute permutation la définition des opérateurs transposition $P_{ij} = P_{\tau_{ij}}$ donnée plus haut.

⁴On pourra consulter l'appendice du tome II du livre de A. Messiah pour plus de détails.

Symétriseur et anti-symétriseur

On définit ces deux opérateurs par :

$$S = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} P_{\sigma} \quad (1.18)$$

$$A = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \epsilon_{\sigma} P_{\sigma} \quad (1.19)$$

Pour $N = 2$ par exemple, on trouve :

$$S = \frac{1}{2} (1 + P_{12}) \quad A = \frac{1}{2} (1 - P_{12}) \quad (1.20)$$

On vérifiera à titre d'exercice les propriétés suivantes :

1. S et A sont hermitiens.
2. $P_{\sigma} S = S$ et $P_{\sigma} A = \epsilon_{\sigma} A$
3. S et A sont des projecteurs : $S^2 = S$ et $A^2 = A$.
4. $SA = AS = 0$.

Attention : il ne faut pas déduire des deux dernières propriétés que S et A sont des projecteurs orthogonaux. En effet, sauf pour le cas $N = 2$, on n'a pas $S + A = 1$.

Fonctions d'onde complètement symétriques ou antisymétriques

L'écriture de ces fonctions se fait maintenant très simplement. On commence par numéroter les particules et par les répartir suivant les états correspondant à la situation physique envisagée :

$$|\Psi\rangle = |1 : \alpha_1, 2 : \alpha_2, \dots, N : \alpha_N\rangle \quad (1.21)$$

On fait ensuite agir sur ce vecteur l'opérateur S pour des bosons ou l'opérateur A pour des fermions. Dans le second cas, le résultat peut se mettre sous la forme d'un déterminant :

$$A|\Psi\rangle = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} 1 : \alpha_1 & 2 : \alpha_1 & \dots & N : \alpha_1 \\ 1 : \alpha_2 & 2 : \alpha_2 & \dots & N : \alpha_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 : \alpha_N & 2 : \alpha_N & \dots & N : \alpha_N \end{vmatrix} \quad (1.22)$$

Sous cette forme, le principe de Pauli apparaît clairement ; dès qu'on essaie de mettre deux particules dans le même état α_i , deux lignes sont égales et le résultat $A|\Psi\rangle$ est nul, ce qui signifie que cette situation n'est pas acceptable physiquement.

Il est immédiat d'après les propriétés de S et A vues ci-dessus que les vecteurs $S|\psi\rangle$ et $A|\psi\rangle$ sont respectivement complètement symétriques ou anti-symétriques et satisfont donc le postulat de symétrisation. Il reste finalement à normer le vecteur obtenu. Ceci constitue un exercice de dénombrement sans difficulté. Effectuons-le d'abord pour des fermions ; on convient d'un ordre pour les états α_i , par exemple suivant leur énergie : $E_1 < E_2 < \dots$. On considère alors l'état $A|\Psi\rangle = A|1 : \alpha_1; 2 : \alpha_2; \dots; N : \alpha_N\rangle$ et on calcule sa norme :

$$\langle \Psi | A^\dagger A | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \epsilon_{\sigma} \langle \Psi | P_{\sigma} | \Psi \rangle \quad (1.23)$$

Puisque tous les α_i sont différents les uns des autres, tous les P_σ ont une contribution nulle sauf l'identité. On a donc :

$$\langle \Psi | A^\dagger A | \Psi \rangle = \frac{1}{N!} \quad (1.24)$$

ce qui donne le vecteur d'état normé pour ce système :

$$\sqrt{N!} A | 1 : \alpha_1; 2 : \alpha_2; \dots; N : \alpha_N \rangle \quad (1.25)$$

Dans la suite, ce vecteur sera noté $|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle$. On notera qu'avec cette convention, une permutation de deux états change le signe du vecteur obtenu. Par exemple $|\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_N\rangle = -|\alpha_2, \alpha_1, \alpha_3, \dots, \alpha_N\rangle$.

Pour des bosons, on range les particules dans l'état $|\Psi\rangle$ de manière ordonnée. Les n_{α_1} premières particules sont dans l'état α_1 , les n_{α_2} suivantes sont dans l'état α_2 , etc... :

$$|\Psi\rangle = | \underbrace{1 : \alpha_1; 2 : \alpha_1; \dots; n_{\alpha_1} : \alpha_1}_{\alpha_1}; \underbrace{n_{\alpha_1} + 1 : \alpha_2; \dots; n_{\alpha_1} + n_{\alpha_2} : \alpha_2; \dots}_{\alpha_2} \rangle \quad (1.26)$$

On a alors

$$\langle \Psi | S^\dagger S | \Psi \rangle = \langle \Psi | S | \Psi \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \langle \Psi | P_{\sigma} | \Psi \rangle \quad (1.27)$$

Deux possibilités peuvent se présenter pour P_σ suivant qu'il laisse ou non globalement invariant les sous-ensembles $\{1, 2, \dots, n_{\alpha_1}\}, \{n_{\alpha_1} + 1, \dots, n_{\alpha_1} + n_{\alpha_2}\}, \dots$. Dans le premier cas, l'élément de matrice $\langle \Psi | P_\sigma | \Psi \rangle$ vaut 1, et il est nul dans le second cas. Il y a donc $n_{\alpha_1}! n_{\alpha_2}! \dots$ opérateurs P_σ ayant une contribution non nulle, de sorte que le vecteur normé complètement symétrique s'écrit :

$$\sqrt{\frac{N!}{n_{\alpha_1}! n_{\alpha_2}! \dots}} S | \underbrace{1 : \alpha_1; 2 : \alpha_1; \dots; n_{\alpha_1} : \alpha_1}_{\alpha_1}; \underbrace{n_{\alpha_1} + 1 : \alpha_2; \dots; n_{\alpha_1} + n_{\alpha_2} : \alpha_2; \dots}_{\alpha_2} \rangle \quad (1.28)$$

Dans la suite, ce vecteur sera noté $|\alpha_1, \alpha_2, \dots\rangle$, avec $\sum_i n_{\alpha_i} = N$. Contrairement au cas des fermions, l'ordre des α_i dans cette écriture est sans importance.

1.3 Conséquences physiques du postulat de symétrisation

1.3.1 Collisions entre deux particules identiques

Maintenant que nous disposons du postulat de symétrisation, le problème soulevé au début de chapitre se résout simplement. Les états initiaux et finals physiquement acceptables lors de la collision de deux particules identiques sont

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \epsilon P_{12}) | 1 : \mathbf{p}_i, 2 : -\mathbf{p}_i \rangle \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \epsilon P_{12}) | 1 : \mathbf{p}_f, 2 : -\mathbf{p}_f \rangle \quad (1.29)$$

où $\epsilon = 1$ pour des bosons et -1 pour des fermions. En introduisant l'opérateur d'évolution U entre l'instant initial et l'instant final, l'amplitude de probabilité pour passer de l'état initial à l'état final s'écrit :

$$\mathcal{A} = \langle 1 : \mathbf{p}_f, 2 : -\mathbf{p}_f | \frac{1 + \epsilon P_{12}}{\sqrt{2}} U \frac{1 + \epsilon P_{12}}{\sqrt{2}} | 1 : \mathbf{p}_i, 2 : -\mathbf{p}_i \rangle \quad (1.30)$$

FIG. 1.2 – Collision coulombienne entre deux noyaux (a) $^{13}\text{C} + ^{12}\text{C}$: particules discernables, (b) $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$: bosons de spin nul indiscernables, $^{13}\text{C} + ^{13}\text{C}$: fermions de spin 1/2 non polarisés, pour lesquels $I(\theta) = (3/4)I(\theta)_{S=1} + (1/4)I(\theta)_{S=0}$.

L'hamiltonien de la collision, et donc l'opérateur U , commutent avec P_{12} . Par conséquent :

$$\mathcal{A} = \langle 1 : \mathbf{p}_f, 2 : -\mathbf{p}_f | (1 + \epsilon P_{12}) U | 1 : \mathbf{p}_i, 2 : -\mathbf{p}_i \rangle \quad (1.31)$$

$$= \mathcal{A}(\mathbf{p}_i \rightarrow \mathbf{p}_f, -\mathbf{p}_i \rightarrow -\vec{p}_f) + \epsilon \mathcal{A}(\mathbf{p}_i \rightarrow -\mathbf{p}_f, -\mathbf{p}_i \rightarrow \mathbf{p}_f) \quad (1.32)$$

Suivant que les particules sont des bosons ou des fermions, il faut donc ajouter ou soustraire les deux amplitudes de probabilité. Cette propriété a des conséquences remarquables. Pour les voir simplement, notons θ l'angle entre \mathbf{p}_i et \mathbf{p}_f ; du fait de l'invariance par rotation du potentiel d'interaction entre les deux particules, l'amplitude $\mathcal{A}(\mathbf{p}_i \rightarrow \mathbf{p}_f, -\mathbf{p}_i \rightarrow -\mathbf{p}_f)$ est une simple fonction de θ que nous noterons $f(\theta)$. La probabilité pour trouver les particules diffusées en $\mathbf{p}_f, -\vec{p}_f$ s'écrit donc :

$$P = |\mathcal{A}|^2 = |f(\theta) + \epsilon f(\pi - \theta)|^2 \quad (1.33)$$

Sous cette forme, on voit par exemple que deux fermions dans le même état interne ne peuvent jamais être diffusés à $\pi/2$. Pour des bosons, cette diffusion est au contraire augmentée par un facteur 2 par rapport à ce qu'elle serait pour des particules discernables ($4|f(\pi/2)|^2$ au lieu de $2|f(\pi/2)|^2$). Sur ce thème, on lira avec profit la référence G.-R. Plattner and I. Sick, Eur. J. Phys. **2**, 109 (1981), dont est extraite la figure 1.2.

A basse énergie, cette formule (1.33) a également des conséquences remarquables. En effet, quand les longueurs de de Broglie des particules deviennent grandes devant la portée des potentiels, on montre (et on le verra dans la suite de ce cours) que $f(\theta)$ tend vers une constante f_0 , ce qui signifie que la distribution de \mathbf{p}_f est isotrope. On dit que les collisions se font dans l'onde s . On en déduit que des fermions à basse température ne subissent plus de collisions, quel que soit l'angle, alors que le taux de collisions pour des bosons est doublé par rapport au cas de particules discernables.

Pour finir, notons que le postulat de symétrisation n'intervient pas dans ce problème si le spin offre un moyen de distinguer les particules. Pour des fermions de spin 1/2 par exemple, si l'état initial est $|1 : \mathbf{p}_i, +; 2 : -\mathbf{p}_i, -\rangle$, il y a deux états finals possibles discernables $|1 : \mathbf{p}_f, +; 2 : -\mathbf{p}_f, -\rangle$ et $|1 : -\mathbf{p}_f, +; 2 : \mathbf{p}_f, -\rangle$. Si le potentiel d'interaction ne dépend pas du spin, ce spin est un "marqueur" de la trajectoire effectivement suivie par la particule, et il faut alors sommer les probabilités, et non les amplitudes, correspondant aux deux chemins possibles.

1.3.2 Interaction effective spin-spin

Nous allons faire ici une théorie très simplifiée de l'atome d'hélium, dont le but est de montrer comment le postulat de symétrisation peut simuler une interaction supplémentaire entre particules. On sépare l'hamiltonien du système en $H = H_0 + V$ avec

$$H_0 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} \quad (1.34)$$

et

$$V = \frac{e^2}{r_{12}} \quad (1.35)$$

Nous traiterons ici l'interaction V entre électrons comme une petite perturbation, ce qui n'est bien sûr pas justifié en toute rigueur puisque V est *a priori* du même ordre que H_0 . Cette approche suffit néanmoins pour souligner les effets essentiels du postulat de symétrisation

Intéressons-nous pour commencer aux états propres de H_0 . L'état fondamental est $|1s, 1s\rangle$. La fonction d'onde spatiale étant symétrique, cet état est forcément anti-symétrique de spin. Le premier niveau excité correspond à la configuration $|1s, 2s\rangle$. D'après ce que nous avons vu ci-dessus, la dégénérescence de cette multiplicité est 4, une base possible étant formée par 3 états symétriques de spin et un état anti-symétrique de spin :

$$|A\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 : 1s; 2 : 2s\rangle + |1 : 2s; 2 : 1s\rangle) \otimes |S = 0, m = 0\rangle \quad (1.36)$$

$$|B_m\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 : 1s; 2 : 2s\rangle - |1 : 2s; 2 : 1s\rangle) \otimes |S = 1, m\rangle \quad m = 0, \pm 1 \quad (1.37)$$

Cherchons maintenant l'effet de V au premier ordre dans cette multiplicité. Comme V ne fait pas intervenir le spin, il est clair que V est diagonal dans la base donnée ci-dessus. Plus précisément, on trouve :

$$\langle A|V|A\rangle = K + J \quad (1.38)$$

$$\langle B_m|V|B_m\rangle = K - J \quad (1.39)$$

où on a introduit les deux termes, appelés respectivement intégrale directe et intégrale d'échange :

$$K = \int \int |\phi_{1s}(\mathbf{r}_1)|^2 |\phi_{2s}(\mathbf{r}_2)|^2 d^3r_1 d^3r_2 \quad (1.40)$$

$$J = \int \int \phi_{1s}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{2s}(\mathbf{r}_1) \phi_{2s}^*(\mathbf{r}_2) \phi_{1s}(\mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 \quad (1.41)$$

Ces deux termes sont positifs, si bien que les niveaux A et B_m sont tous les quatre déplacés vers le haut (figure (1.3.a)). Le niveau A est au-dessus des niveaux B_m , l'écart $2J$ étant de l'ordre de 0.8 eV. Cet ordre se comprend simplement : dans le niveau A , qui a une fonction d'onde spatiale symétrique, les deux électrons peuvent se trouver au même endroit, et la répulsion électrostatique V a un effet plus marqué que pour les niveaux B_m pour lesquels les deux électrons ont une densité de probabilité nulle de se trouver au même endroit.

On rend souvent compte de cette levée de dégénérescence entre A et B_m par une interaction effective spin-spin en $K - J/2 - 2J\mathbf{S}_1 \cdot \vec{S}_2/\hbar^2$ qui clive elle aussi la multiplicité d'ordre 4 en deux niveaux, l'état $S = 0$ étant déplacé de $K + J$ et les $S = 1, m = 0, \pm 1$ de $K - J$. C'est en particulier une telle interaction effective qui est utilisée pour traiter mathématiquement le

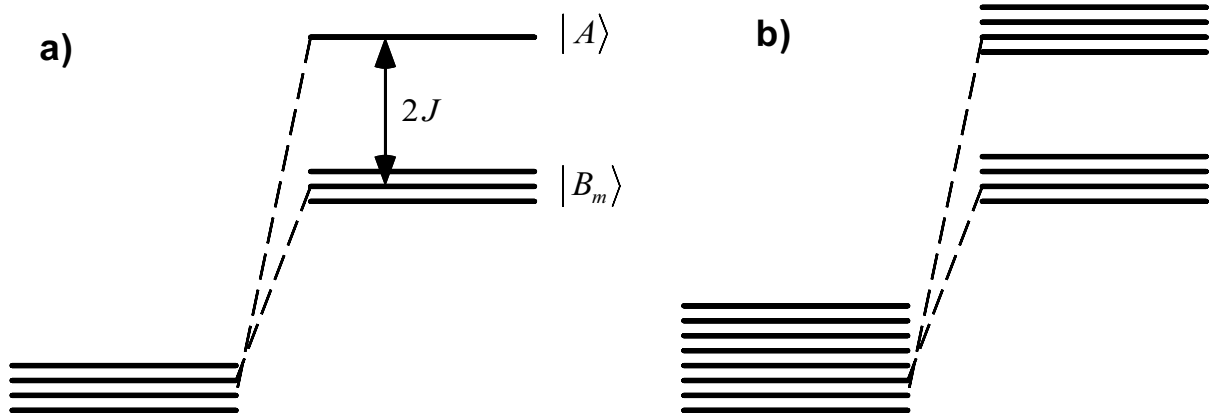


FIG. 1.3 – (a) Position des niveaux de la multiplicité $(1s,2s)$ de l'atome d'hélium lorsque l'interaction électrostatique entre électrons est prise en compte perturbativement. (b) Ce qui se passerait en l'absence du principe de Pauli.

ferromagnétisme, dans des modèles type Ising. Il importe néanmoins de garder à l'esprit que l'origine physique du clivage n'est pas une interaction magnétique entre spins (elle existe, mais est beaucoup plus faible), mais une interaction électrostatique.

Il faut également bien comprendre le rôle du postulat de symétrisation dans cette levée de dégénérescence entre A et les B_m . Ce n'est pas le postulat de symétrisation qui provoque le déplacement des niveaux, puisque, comme nous l'avons indiqué plus haut, ce postulat n'est pas responsable d'une interaction supplémentaire entre particules. Sans le postulat de symétrisation, on serait parti d'une multiplicité de dimension 8, engendrée par :

$$\{|1 : 1s, 2 : 2s\rangle \otimes |\sigma_1, \sigma_2\rangle, |1 : 2s, 2 : 1s\rangle \otimes |\sigma_1, \sigma_2\rangle\} \quad (1.42)$$

où les $\sigma_i = \pm 1$ sont les variables de spin. L'action de V dans cette multiplicité est décrite par une matrice 8×8 , qui est diagonale par blocs avec 4 sous matrices 2×2 , puisque V ne peut pas connecter deux états de spin $\langle \sigma_1, \sigma_2 |$ et $|\sigma'_1, \sigma'_2\rangle$ différents. Chaque matrice 2×2 vaut

$$\begin{pmatrix} K & J \\ J & K \end{pmatrix} \quad (1.43)$$

dont les valeurs propres sont $K + J$ et $K - J$. Par conséquent l'action de V est de cliver la multiplicité initiale d'ordre 8, en deux sous-multiplicités d'ordre 4 déplacées de $K \pm J$ (figure 1.3.b). Le postulat de symétrisation a eu pour rôle de supprimer 3 états dans une de ces sous-multiplicités (celle en $K + J$) et un état dans l'autre (celle en $K - J$).

1.3.3 L'émission stimulée

Considérons maintenant la diffusion par un potentiel extérieur d'une particule initialement dans un état i . A partir de l'opérateur d'évolution u à une particule, on calcule l'amplitude de probabilité :

$$\mathcal{A}_{if}^{(1)} = \langle f | u | i \rangle \quad (1.44)$$

pour que la particule soit après diffusion dans un état $f \neq i$. La question que nous abordons ici est de savoir comment est modifiée cette amplitude de probabilité si N particules identiques à la

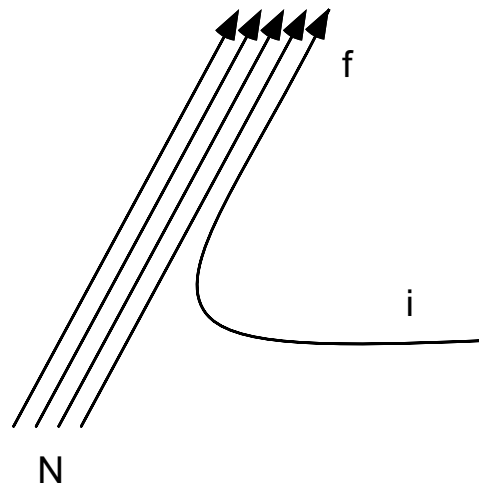


FIG. 1.4 – “Emission” stimulée (ou transfert stimulé) d’un boson dans un état déjà occupé.

particule diffusée sont déjà présentes dans l’état f (figure 1.4). On s’intéresse donc au processus :

$$1 \text{ particule en } i + N \text{ particules en } f \longrightarrow N + 1 \text{ particules en } f \quad (1.45)$$

Il est clair que cette question n’a de sens que pour des bosons. Elle se résout en numérotant les particules, puis en symétrisant correctement l’état initial et l’état final :

$$|\Psi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N+1}} (|1 : i; 2 : f; \dots; N + 1 : f\rangle + \dots + |1 : f; 2 : f; \dots; N + 1 : i\rangle) \quad (1.46)$$

$$|\Psi_f\rangle = |1 : f; 2 : f; \dots; N + 1 : f\rangle \quad (1.47)$$

L’amplitude de probabilité est alors donnée par $\langle \Psi_f | U | \Psi_i \rangle$ où U est l’opérateur d’évolution pour les $N + 1$ particules. Dans l’hypothèse où les particules sont sans interaction, cet opérateur est simplement le produit des opérateurs à une particule : $U = u^{(1)} \otimes u^{(2)} \otimes \dots \otimes u^{(N+1)}$. Les $N + 1$ composantes de $|\Psi_i\rangle$ ont la même contribution et l’amplitude de probabilité est donc donnée par :

$$\mathcal{A}_{if}^{(N+1)} = \sqrt{N+1} \mathcal{A}_{if}^{(1)} \quad (1.48)$$

où on a supposé que le potentiel diffusif pouvait être traité perturbativement de sorte que $\mathcal{A}_{if}^{(1)} \simeq 1$;

La probabilité de diffusion de i vers f est donc multipliée par un facteur $N + 1$. En d’autres termes, à la probabilité d’avoir une diffusion “spontanée” de i vers f (probabilité $|\mathcal{A}_{if}^{(1)}|^2$), vient s’ajouter une probabilité N fois plus grande, correspondant à une diffusion “stimulée” par les N particules déjà présentes. Ce phénomène de diffusion ou d’émission stimulée joue un rôle essentiel en physique du rayonnement ; c’est lui qui est à la base du laser, en favorisant l’émission de photons supplémentaires dans un mode du champ électromagnétique qui contenant déjà des photons.

Pour des fermions, on peut écrire une expression similaire en posant $|\mathcal{A}_{if}|^2 = (1 - N)|\mathcal{A}_{if}^{(1)}|^2$, avec $N = 0$ ou 1 ce qui exprime que la probabilité d’aller vers l’état f est nulle si cet état est déjà occupé ($N = 1$).

1.3.4 Statistiques quantiques

Considérons un système de N particules sans interaction, confinées dans une boîte de volume V et en contact avec un thermostat à température T . Le nombre de particules dans un état $|\alpha\rangle$ donné s'écrit :

$$n_\alpha = \exp\left(-\frac{E_\alpha - \mu}{kT}\right) \quad (1.49)$$

pour la statistique de Boltzmann et

$$n_\alpha = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_\alpha - \mu}{kT}\right) \mp 1} \quad - \text{ pour des bosons, } + \text{ pour des fermions,} \quad (1.50)$$

pour les statistiques de Bose et de Fermi. Le potentiel chimique μ est déterminé en écrivant que le système contient N particules :

$$N = \sum_{\alpha} n_\alpha \quad (1.51)$$

Cette expression peut se justifier simplement si l'on fait un bilan détaillé des collisions dans le gaz. Considérons 4 impulsions $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$ telles que :

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2 \quad \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} = \frac{p_1'^2}{2m} + \frac{p_2'^2}{2m} \quad (1.52)$$

de sorte que les collisions :

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \longrightarrow \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2 \quad (1.53)$$

$$\mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2 \longrightarrow \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \quad (1.54)$$

sont permises. A l'équilibre, il doit y avoir autant de collisions dans le sens (1.53) que dans le sens (1.54). Pour un gaz de Boltzmann, dans lequel il n'y a aucun phénomène d'émission stimulée, ceci impose

$$n_{\mathbf{p}_1} n_{\mathbf{p}_2} = n_{\mathbf{p}'_1} n_{\mathbf{p}'_2} \quad (1.55)$$

Pour satisfaire cette égalité quel que soit le quadruplet $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$ vérifiant (1.52), on peut montrer qu'il faut :

$$n_{\mathbf{p}} = z \exp(-\beta E) \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

où β et $z = e^{\beta\mu}$ sont des paramètres que l'on fixe à partir du nombre de particules et de l'énergie moyenne du gaz.

Considérons maintenant un gaz de bosons. Du fait des processus d'émission stimulée, la probabilité d'une collision dans le sens (1.53) sera proportionnelle à :

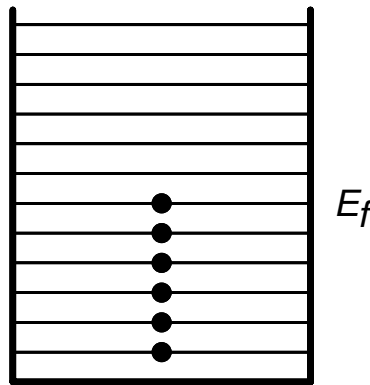
$$n_{\mathbf{p}_1} n_{\mathbf{p}_2} (1 + n_{\mathbf{p}'_1}) (1 + n_{\mathbf{p}'_2})$$

Pour le sens (1.54), on trouvera de même une probabilité proportionnelle à :

$$n_{\mathbf{p}'_1} n_{\mathbf{p}'_2} (1 + n_{\mathbf{p}_1}) (1 + n_{\mathbf{p}_2})$$

Le bilan détaillé impose alors :

$$n_{\mathbf{p}_1} n_{\mathbf{p}_2} (1 + n_{\mathbf{p}'_1}) (1 + n_{\mathbf{p}'_2}) = n_{\mathbf{p}'_1} n_{\mathbf{p}'_2} (1 + n_{\mathbf{p}_1}) (1 + n_{\mathbf{p}_2})$$

FIG. 1.5 – Remplissage des états à $T = 0$ pour un gaz de Fermi

soit

$$\frac{n_{\mathbf{p}_1}}{1 + n_{\mathbf{p}_1}} \frac{n_{\mathbf{p}_2}}{1 + n_{\mathbf{p}_2}} = \frac{n_{\mathbf{p}'_1}}{1 + n_{\mathbf{p}'_1}} \frac{n_{\mathbf{p}'_2}}{1 + n_{\mathbf{p}'_2}}$$

dont la solution est comme pour (1.55) :

$$\frac{n_{\mathbf{p}}}{1 + n_{\mathbf{p}}} = z \exp(-\beta E)$$

ou encore :

$$n_{\mathbf{p}} = \frac{1}{z^{-1} e^{\beta E} - 1}$$

qui n'est autre que la loi de Bose-Einstein. Cette loi est donc une conséquence directe de la conjonction des phénomènes d'émission stimulée et spontanée. De même, en prenant en compte le facteur $1 - N$ trouvé au paragraphe précédent pour des fermions, on trouve directement la loi de Fermi-Dirac.

A haute température, pour une densité $\rho = N/V$ fixée, l'influence de la statistique quantique est peu important. On peut montrer que le ± 1 qui figure au dénominateur de (1.50) joue un rôle négligeable car le potentiel chimique tend vers $-\infty$. On retrouve alors une statistique de Boltzmann : $n_{\alpha} \propto \exp(-E_{\alpha}/kT)$.

A basse température, l'effet de la statistique est au contraire essentiel. Pour des fermions, à $T = 0$, il y a remplissage de tous les niveaux disponibles jusqu'à une valeur d'énergie notée E_f , le niveau de Fermi (figure 1.5). La valeur de l'énergie E_f peut être considérable ; pour le métal sodium par exemple, on trouve $E_f = 3$ eV, que l'on associerait, dans le cadre d'une statistique de Boltzmann, à une température $T = 36\,000$ Kelvins. Le principe de Pauli a des conséquences multiples, qui vont de la physique des métaux et des semi-conducteurs jusqu'à la stabilité des étoiles en fin de vie, comme les étoiles "naines blanches", composées d'un plasma d'électrons et de noyaux, ou les étoiles à neutrons. Citons encore la stabilité β des noyaux : alors qu'un neutron isolé est instable ($n \rightarrow p + e + \bar{\nu}$ avec une durée de vie de l'ordre de 15 minutes), il devient stable dans un noyau car le proton formé dans la désintégration devrait aller se mettre sur un niveau d'énergie déjà occupé.

Pour des bosons, une conséquence spectaculaire de la statistique quantique est la condensation de Bose-Einstein. Si la densité des particules $\rho = N/V$ est telle que

$$\rho \Lambda_T^3 > 2.612 \quad \Lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k T}} \quad (1.56)$$

il se produit une accumulation macroscopique de particules dans l'état fondamental de la boîte confinant les particules. En d'autres termes, quand on prend la limite thermodynamique $N, V \rightarrow \infty$, la température T et la densité ρ restant constantes, la proportion d'atomes dans l'état fondamental n_0/N tend vers une constante non nulle. Sans faire la démonstration explicite ici (elle figure dans tous les cours de maîtrise de physique statistique), indiquons qualitativement l'origine du phénomène. Tout d'abord, remarquons qu'à température rigoureusement nulle, le résultat est identique à celui de la statistique de Maxwell-Boltzmann. C'est à température non nulle que le phénomène est remarquable. Pour comprendre qualitativement cet aspect grégaire du comportement des bosons, considérons deux états accessibles de même énergie, un état où toutes les particules sont sur le même niveau α_0 , noté $|\alpha_0, \dots, \alpha_0\rangle$, et un autre état où les N particules sont dans des états différents $|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle$. Dans la statistique de Boltzmann, ces deux états ont un poids très différents car le second est affecté d'un facteur $N!$: par exemple, les deux réalisations $|1 : \alpha_1, 2 : \alpha_2, \dots\rangle$ et $|1 : \alpha_2, 2 : \alpha_1, \dots\rangle$ sont possibles. Dans la statistique de Bose-Einstein au contraire, ces deux états ont chacun un poids 1. Les états où plusieurs particules se trouvent sur le même niveau sont donc très favorisés dans la statistique de Bose-Einstein par rapport à la statistique de Boltzmann.

Jusqu'au mois de juin 1995, l'exemple habituel de condensat de Bose-Einstein était l'hélium superfluide. Néanmoins les interactions importantes qui prennent place au sein du liquide rendent le traitement quantitatif de la transition superfluide très complexe et relativement éloigné de la théorie simple de la condensation d'un gaz parfait. Par exemple, la fraction d'atomes condensés ne dépasse pas 10 % alors qu'elle devrait atteindre 100 % dans un gaz parfait à température nulle.

On dispose désormais d'expériences menées sur des gaz atomiques ultra-froids (100 nK) piégés dans un piège magnétique⁵ (figure 1.6). On réalise avec des bobines ou des aimants permanents un minimum local de $|\mathbf{B}|$. Les atomes, qui portent un moment magnétique $\boldsymbol{\mu}$, sont préparés dans un état tel que $\boldsymbol{\mu}$ soit anti-parallèle à \mathbf{B} . Si les atomes ne bougent pas trop vite, $\boldsymbol{\mu}$ et \mathbf{B} vont rester anti-parallèles au cours du mouvement des atomes dans le champ. Sous cette condition, le potentiel magnétique $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = |\boldsymbol{\mu}| \cdot |\mathbf{B}|$ tend à confiner les atomes au voisinage du minimum du champ. Les atomes sont initialement préparés dans un piège magnéto-optique, puis transférés dans un piège magnétique. Ils sont refroidis jusqu'à la condensation par refroidissement évaporatif ; ce refroidissement consiste à éliminer les atomes les plus énergétiques pour ne conserver que les atomes les plus lents, les collisions entre atomes piégés rétablissant en permanence l'équilibre thermodynamique. En partant de 10^9 atomes, on arrive ainsi à produire après évaporation une situation où les 10^6 atomes restants sont quasiment tous dans l'état fondamental du piège harmonique, éventuellement modifié par les interactions. On attend pour ce système des propriétés de cohérence fascinantes, analogues à celles de la lumière laser, dans laquelle tous les photons sont stockés dans le même mode d'une cavité électromagnétique. Son étude constitue un des domaines de recherche les plus actifs de ces dernières années.

⁵Voir M.H. Anderson *et al*, Science **269**, 198 (1995) pour la première réalisation expérimentale, et F. Dalfovo *et al*, Reviews of Modern Physics, Vol. 71, No. 3, April 1999, pour une revue récente.

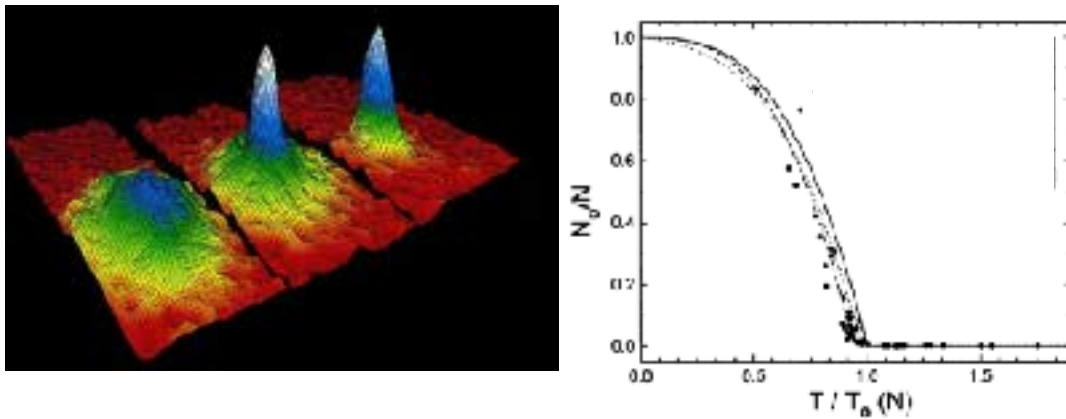


FIG. 1.6 – (a) Distribution en impulsion d'un gaz de bosons au dessus, au voisinage, et en dessous du seuil de condensation de Bose-Einstein. Pour la troisième image, la majeure partie des atomes (rubidium) est accumulée dans l'état fondamental du piège magnétique confinant le gaz. (b) Fraction condensée en fonction de la température mesurée par rapport à la température critique; cette courbe, obtenue avec un condensat de $\sim 10^5$ atomes de sodium, est extraite de J. R. Ensher et al, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4984 (1996).

Chapitre 2

La seconde quantification

Le postulat de symétrisation lève toute ambiguïté sur les systèmes comportant des particules identiques. Néanmoins les calculs impliquant des fonctions d'onde symétrisées ou anti-symétrisées sont peu commodes à mener. Considérons par exemple le calcul de la valeur moyenne dans un état donné d'un opérateur "à une particule" :

$$F = \sum_{i=1}^N f^{(i)} \quad (2.1)$$

L'opérateur $f^{(i)}$ agit seulement sur la i -ème particule ; ce peut être son énergie cinétique $p_i^2/2m$ par exemple. Cette valeur moyenne $\langle \psi | F | \psi \rangle$ contient *a priori* $N! \times N \times N!$ termes si on prend pour ψ l'expression symétrisée obtenue au chapitre qui précède. Même si beaucoup de termes sont nuls, le calcul apparaît bien complexe...

Le but de ce chapitre est de présenter un formalisme rendant ces calculs beaucoup plus transparents, et permettant en plus de traiter les problèmes où le nombre de particules varie (absorption ou émission de photons, de phonons,...).

2.1 L'espace de Fock : création et annihilation de particules

2.1.1 Définition

Cet espace \mathcal{E} se définit comme la somme directe des espaces de Hilbert à nombre de particules fixé :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}^{(0)} \oplus \mathcal{E}^{(1)} \oplus \mathcal{E}^{(2)} \oplus \dots \oplus \mathcal{E}^{(N)} \oplus \dots \quad (2.2)$$

- L'espace $\mathcal{E}^{(0)}$ est par hypothèse un espace de dimension 1, engendré par un vecteur noté $|0\rangle$ et appelé *vide de particules*. Il ne faut pas le confondre avec le vecteur nul ; le vide est un état normé parfaitement respectable : $\langle 0|0\rangle = 1$.
- L'espace $\mathcal{E}^{(1)}$ est l'espace à une particule engendré par la base Hilbertienne notée $\mathcal{B} = \{|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \dots\}$.
- L'espace $\mathcal{E}^{(N)}$ est l'espace à N particules engendré par les fonctions complètement symétriques ou complètement anti-symétriques définies au chapitre précédent :

$$|n_\alpha, n_\beta, \dots\rangle \propto S|1 : \alpha, \dots\rangle \quad \text{pour des bosons} \quad (2.3)$$

$$|\alpha, \beta, \dots\rangle \propto A|1 : \alpha, 2 : \beta \dots\rangle \quad \text{pour des fermions} \quad (2.4)$$

(attention : $|\alpha, \beta, \mu, \dots\rangle = -|\beta, \alpha, \mu, \dots\rangle$)

2.1.2 Opérateurs création et annihilation pour des bosons

Ces opérateurs créent ou détruisent une particule dans un état μ de la base \mathcal{B} . Ces opérateurs font donc passer de n'importe quel espace $\mathcal{E}^{(N)}$ à l'espace $\mathcal{E}^{(N\pm 1)}$ avec les éléments de matrice suivants :

$$a_\mu : \mathcal{E}^{(N)} \longrightarrow \mathcal{E}^{(N-1)}$$

$$a_\mu |n_\alpha, n_\beta, \dots, n_\mu, \dots\rangle = \sqrt{n_\mu} |n_\alpha, n_\beta, \dots, n_\mu - 1, \dots\rangle \quad \text{si } n_\mu \neq 0 \quad (2.5)$$

$$= 0 \quad \text{si } n_\mu = 0 \quad (2.6)$$

pour l'opérateur destruction et

$$a_\mu^\dagger : \mathcal{E}^{(N)} \longrightarrow \mathcal{E}^{(N+1)}$$

$$a_\mu^\dagger |n_\alpha, n_\beta, \dots, n_\mu, \dots\rangle = \sqrt{n_\mu + 1} |n_\alpha, n_\beta, \dots, n_\mu + 1, \dots\rangle \quad (2.7)$$

pour l'opérateur création. Les préfacteurs $\sqrt{n_\mu}$ et $\sqrt{n_\mu + 1}$ permettent une simplification considérable dans l'écriture des opérateurs, comme nous le verrons plus loin.

Il est simple de vérifier que a_μ et a_μ^\dagger sont conjugués hermitiens, comme cette écriture le laisse supposer. Par ailleurs, ils vérifient les relations de commutation très importantes :

$$[a_\mu, a_\nu] = 0 \quad [a_\mu^\dagger, a_\nu^\dagger] = 0 \quad [a_\nu, a_\mu^\dagger] = \delta_{\mu\nu} \quad (2.8)$$

Démontrons par exemple la troisième de ces relations en calculant l'action sur les vecteurs de base. Si $\mu \neq \nu$, on a :

$$a_\mu^\dagger a_\nu | \dots, n_\mu, n_\nu, \dots \rangle = a_\mu^\dagger \sqrt{n_\nu} | \dots, n_\mu, n_\nu - 1, \dots \rangle$$

$$= \sqrt{(n_\mu + 1)n_\nu} | \dots, n_\mu + 1, n_\nu - 1, \dots \rangle$$

$$= a_\nu a_\mu^\dagger | \dots, n_\mu, n_\nu, \dots \rangle \quad (2.9)$$

Si $\mu = \nu$:

$$a_\mu^\dagger a_\mu | \dots, n_\mu, \dots \rangle = a_\mu^\dagger \sqrt{n_\mu} | \dots, n_\mu - 1, \dots \rangle$$

$$= n_\mu | \dots, n_\mu, \dots \rangle \quad (2.10)$$

$$a_\mu a_\mu^\dagger | \dots, n_\mu, \dots \rangle = a_\mu \sqrt{n_\mu + 1} | \dots, n_\mu + 1, \dots \rangle$$

$$= (n_\mu + 1) | \dots, n_\mu, \dots \rangle \quad (2.11)$$

Par différence, on retrouve bien la relation cherchée.

Notons que $a_\mu^\dagger |\psi\rangle$ n'est jamais nul si $|\psi\rangle$ est non nul. En effet, sa norme s'écrit :

$$\|a_\mu^\dagger |\psi\rangle\|^2 = \langle \psi | a_\mu a_\mu^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | a_\mu^\dagger a_\mu | \psi \rangle + \langle \psi | \psi \rangle = \|a_\mu |\psi\rangle\|^2 + \|\psi\rangle\|^2 \quad (2.12)$$

En termes physiques, il est toujours possible de créer des bosons dans un état donné.

2.1.3 Opérateurs création et annihilation pour des fermions

Ces opérateurs se définissent d'une manière analogue à ce que nous avons fait pour des bosons, avec toutefois une légère complication liée à l'importance de l'ordre dans lequel apparaissent les différents α_i lors de l'écriture d'un vecteur d'état :

$$a_\mu : \mathcal{E}^{(N)} \longrightarrow \mathcal{E}^{(N-1)}$$

$$a_\mu | \mu, \alpha, \beta, \dots \rangle = | \alpha, \beta, \dots \rangle \quad (2.13)$$

$$a_\mu | \alpha, \beta, \dots \rangle = 0 \quad \text{si } \mu \text{ n'est pas peuplé} \quad (2.14)$$

pour l'opérateur destruction et

$$a_\mu^\dagger : \mathcal{E}^{(N)} \longrightarrow \mathcal{E}^{(N+1)}$$

$$a_\mu^\dagger |\alpha, \beta, \dots\rangle = |\mu, \alpha, \beta, \dots\rangle \quad \text{si } \mu \text{ n'est pas peuplé} \quad (2.15)$$

$$a_\mu^\dagger |\alpha, \beta, \dots, \mu, \dots\rangle = 0 \quad (2.16)$$

pour l'opérateur création. La dernière ligne permet de prendre en compte simplement le principe de Pauli : contrairement au cas des bosons, il n'est pas possible de créer une particule dans un état μ si cet état est déjà occupé.

Ici encore, on vérifiera que a_μ et a_μ^\dagger sont conjugués hermitiens. Les relations de commutation trouvées pour des bosons deviennent maintenant des relations d'anti-commutation¹ :

$$[a_\mu, a_\nu]_+ = 0 \quad [a_\mu^\dagger, a_\nu^\dagger]_+ = 0 \quad [a_\nu, a_\mu^\dagger]_+ = \delta_{\mu\nu} \quad (2.17)$$

où on a posé $[A, B]_+ = AB + BA$. Démontrons la troisième de ces relations : Si $\mu \neq \nu$, il faut regarder l'action de $a_\nu a_\mu^\dagger$ et $a_\mu^\dagger a_\nu$ sur un état contenant une particule dans ν et ne contenant pas de particule dans μ , sinon on trouve 0 :

$$a_\mu^\dagger a_\nu |\nu, \alpha, \beta, \dots\rangle = a_\mu^\dagger |\alpha, \beta, \dots\rangle = |\mu, \alpha, \beta, \dots\rangle \quad (2.18)$$

$$a_\nu a_\mu^\dagger |\nu, \alpha, \beta, \dots\rangle = a_\nu |\mu, \nu, \alpha, \beta, \dots\rangle = -a_\nu |\nu, \mu, \alpha, \beta, \dots\rangle = -|\mu, \alpha, \beta, \dots\rangle \quad (2.19)$$

soit $a_\mu^\dagger a_\nu + a_\nu a_\mu^\dagger = 0$ si $\mu \neq \nu$. Si $\mu = \nu$, regardons l'action de $a_\mu^\dagger a_\mu$ et $a_\mu a_\mu^\dagger$ sur les vecteurs avec une particule dans l'état μ , puis sur les vecteurs pour lequel l'état μ est vide. On trouve dans le premier cas :

$$a_\mu^\dagger a_\mu |\mu, \alpha, \beta, \dots\rangle = a_\mu^\dagger |\alpha, \beta, \dots\rangle = |\mu, \alpha, \beta, \dots\rangle \quad (2.20)$$

$$a_\mu a_\mu^\dagger |\mu, \alpha, \beta, \dots\rangle = 0 \quad (2.21)$$

et dans le second cas :

$$a_\mu^\dagger a_\mu |\alpha, \beta, \dots\rangle = 0 \quad (2.22)$$

$$a_\mu a_\mu^\dagger |\alpha, \beta, \dots\rangle = a_\mu |\mu, \alpha, \beta, \dots\rangle = |\alpha, \beta, \dots\rangle \quad (2.23)$$

Dans les deux cas on trouve $a_\mu a_\mu^\dagger + a_\mu^\dagger a_\mu = 1$, ce qui démontre la relation d'anti-commutation annoncée.

2.1.4 Remarques

- L'opérateur $a_\mu^\dagger a_\mu$ est appelé opérateur nombre de particules dans l'état μ . En effet, il est immédiat d'après ce qui précède que ses vecteurs propres sont les états pour lesquels le nombre de particules dans l'état μ est bien défini, la valeur propre correspondante étant précisément ce nombre. Ceci est valable aussi bien pour les bosons que les fermions.
- Un opérateur également très utile est l'opérateur nombre total de particules :

$$\hat{N} = \sum_{\mu} a_\mu^\dagger a_\mu \quad (2.24)$$

¹Ce point fut noté pour la première fois par Jordan et Wigner, Z. Physik, **47**, 631 (1928)

– Signalons enfin comment construire un état donné à partir du vide. On a :

$$|n_\alpha, n_\beta, \dots\rangle = \frac{(a_\alpha^\dagger)^{n_\alpha} (a_\beta^\dagger)^{n_\beta} \dots |0\rangle}{\sqrt{n_\alpha! n_\beta! \dots}} \quad \text{pour des bosons} \quad (2.25)$$

$$|\alpha, \beta, \dots\rangle = a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger \dots |0\rangle \quad \text{pour des fermions} \quad (2.26)$$

2.1.5 L'opérateur champ

Nous avons vu dans le paragraphe qui précède comment créer ou détruire une particule dans un état donné d'une base Hilbertienne. Il est également possible de définir un opérateur de création ou de destruction dans un état donné d'une base continue. L'exemple le plus utile est l'opérateur champ $\Psi(\mathbf{r})$ qui détruit une particule au point \mathbf{r} , et son conjugué $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ qui crée une particule en ce point.

La construction de cet opérateur champ se fait simplement à partir des a_μ . On utilise le développement de $|\mathbf{r}\rangle$ sur la base $\{|\mu\rangle\}$:

$$|\mathbf{r}\rangle = \left(\sum_\mu |\mu\rangle \langle \mu| \right) |\mathbf{r}\rangle = \sum_\mu \mu^*(\mathbf{r}) |\mu\rangle \quad (2.27)$$

L'opérateur $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ agissant sur le vide doit créer un état à une particule localisée en \mathbf{r} . On est donc conduit à :

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r})|0\rangle = \sum_\mu \mu^*(\mathbf{r}) a_\mu^\dagger |0\rangle \quad (2.28)$$

soit

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_\mu \mu^*(\mathbf{r}) a_\mu^\dagger \quad (2.29)$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_\mu \mu(\mathbf{r}) a_\mu \quad (2.30)$$

Les relations de commutation de l'opérateur champ se déduisent simplement des relations trouvées pour les a_μ :

$$[\Psi(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}')]_{(+)} = 0 \quad [\Psi^\dagger(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')]_{(+)} = 0 \quad [\Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')]_{(+)} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.31)$$

Démontrons par exemple la troisième relation :

$$\begin{aligned} [\Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')]_{(+)} &= \sum_{i,j} \mu_i(\mathbf{r}) \mu_j^*(\mathbf{r}') [a_{\mu_i}, a_{\mu_j}^\dagger]_{(+)} \\ &= \sum_{i,j} \mu_i(\mathbf{r}) \mu_j^*(\mathbf{r}') \delta_{ij} \\ &= \langle \mathbf{r} | \left(\sum_i |\mu_i\rangle \langle \mu_i| \right) | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (2.32)$$

2.2 Les opérateurs en seconde quantification

L'introduction des opérateurs création et annihilation va permettre de donner des expressions remarquablement simples pour les opérateurs agissant dans l'espace de Hilbert décrivant un ensemble de particules identiques. Ce formalisme est appelé *seconde quantification* pour une raison qui sera présentée en §2.3.

2.2.1 Expression générale des opérateurs à une et deux particules

Nous considérerons dans ce paragraphe les deux types d'opérateurs les plus fréquents, les opérateurs à une particule :

$$F = \sum_{i=1}^N f^{(i)} \quad (2.33)$$

comme l'énergie cinétique, ou l'énergie potentielle dans un champ de forces extérieures, et les opérateurs à deux particules :

$$G = \frac{1}{2} \sum_{i,j(i \neq j)} g^{(i,j)} \quad (2.34)$$

comme l'énergie due aux interactions binaires entre les particules du système. Ces opérateurs sont caractérisés par leurs éléments de matrice dans la base Hilbertienne :

$$f_{\beta\alpha} = \langle \beta | f | \alpha \rangle \quad g_{\gamma\delta\alpha\beta} = \langle 1 : \gamma; 2 : \delta | g^{(1,2)} | 1 : \alpha; 2 : \beta \rangle \quad (2.35)$$

Considérons l'action de F sur un vecteur complètement symétrique ou complètement anti-symétrique, correspondant à un état à N particules. Dans ce qui suit, nous traiterons explicitement le cas des bosons, mais le cas des fermions se résout de la même manière. On part de

$$F |n_{\alpha_1}, \dots\rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_{\alpha_1}! \dots}} FS |1 : \alpha_1; \dots; N : \alpha_N\rangle \quad (2.36)$$

où les états $\alpha_1, \dots, \alpha_N$ figurant au deuxième membre peuvent être différents ou identiques. L'opérateur F est symétrique vis à vis de toute permutation de particules et il commute avec S ou A . Par conséquent :

$$F |n_{\alpha_1}, \dots\rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_{\alpha_1}! \dots}} \sum_{i=1}^N S f^{(i)} |1 : \alpha_1; \dots; i : \alpha_i; \dots\rangle \quad (2.37)$$

Nous remplaçons $f^{(i)}$ par son expression :

$$f^{(i)} = \sum_{\alpha, \beta} f_{\beta, \alpha} |i : \beta\rangle \langle i : \alpha| \quad (2.38)$$

ce qui donne :

$$F |n_{\alpha_1}, \dots\rangle = \sum_{\alpha, \beta} f_{\beta, \alpha} \sum_{i=1}^N \delta_{\alpha, \alpha_i} \sqrt{\frac{N!}{n_{\alpha_1}! \dots n_{\alpha_i}! \dots}} S |1 : \alpha_1; \dots; i : \beta; \dots\rangle \quad (2.39)$$

La normalisation des états symétrisés donne dans le cas $\alpha \neq \beta$:

$$\delta_{\alpha, \alpha_i} \sqrt{\frac{N!}{n_{\alpha_1}! \dots n_{\alpha_i}! \dots}} S |1 : \alpha_1; \dots; i : \beta; \dots\rangle = \delta_{\alpha, \alpha_i} \frac{\sqrt{n_{\beta} + 1}}{\sqrt{n_{\alpha}}} | \dots, n_{\alpha} - 1, n_{\beta} + 1, \dots \rangle \quad (2.40)$$

et pour le cas $\alpha = \beta$:

$$\delta_{\alpha, \alpha_i} \sqrt{\frac{N!}{n_{\alpha_1}! \dots n_{\alpha_i}! \dots}} S |1 : \alpha_1; \dots; i : \beta; \dots\rangle = \delta_{\alpha, \alpha_i} | \dots, n_{\alpha}, \dots \rangle \quad (2.41)$$

Ce terme apparaît n_α fois dans la somme sur i ; par conséquent :

$$F|n_{\alpha_1}, \dots\rangle = \sum_{\alpha, \beta (\alpha \neq \beta)} f_{\beta\alpha} \sqrt{n_\alpha(n_\beta + 1)} |\dots, n_\alpha - 1, n_\beta + 1, \dots\rangle + \sum_{\alpha} n_\alpha f_{\alpha, \alpha} |\dots, n_\alpha, \dots\rangle \quad (2.42)$$

Sous cette forme, il apparaît clairement que l'opérateur F peut encore s'écrire :

$$F = \sum_{\alpha, \beta} f_{\beta\alpha} a_\beta^\dagger a_\alpha \quad (2.43)$$

C'est la simplicité de cette forme qui justifie les choix que nous avons faits lors de la définition des opérateurs création et annihilation.

La démonstration que nous avons faite se généralise au cas des opérateurs à deux particules pour donner :

$$G = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} g_{\gamma\delta\alpha\beta} a_\gamma^\dagger a_\delta^\dagger a_\beta a_\alpha \quad (2.44)$$

Ces deux expressions pour F et G sont valables pour les bosons et les fermions.

2.2.2 Exemples

Pour des particules n'interagissant pas entre elles, l'hamiltonien du système est une somme d'opérateurs à une particule :

$$H = \sum_i h^{(i)} \quad (2.45)$$

On choisit alors fréquemment la base propre de h comme base $|\alpha\rangle$, de sorte que l'hamiltonien s'écrit en seconde quantification :

$$H = \sum_{\alpha} \epsilon_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha \quad (2.46)$$

où ϵ_α est la valeur propre associée au vecteur propre $|\alpha\rangle$ de h . L'interprétation de ce résultat est très simple : l'énergie totale est obtenue en comptant le nombre de particules sur chaque niveau $|\alpha\rangle$ et en multipliant ce nombre par l'énergie associée au niveau. Ainsi, pour un gaz de particules confinées dans une boîte de volume L^3 , on utilisera :

$$H_0 = \sum_{\mathbf{p}} \frac{p^2}{2m} a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}} \quad (2.47)$$

où $a_{\mathbf{p}}$ détruit une particule dans l'état "onde plane" $e^{i\vec{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}/\sqrt{L^3}$.

Pour un système de particules en interaction binaire, on a un terme d'énergie d'interaction :

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i, j (i \neq j)} v(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (2.48)$$

Ecrivons l'expression de cet opérateur en seconde quantification, en utilisant les opérateurs $a_{\mathbf{p}}$ introduits ci-dessus. Il faut calculer :

$$\begin{aligned} V_{\gamma\delta\alpha\beta} = V_{\mathbf{p}_3\mathbf{p}_4\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2} &= \langle 1 : \mathbf{p}_3; 2 : \mathbf{p}_4 | v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) | 1 : \mathbf{p}_1; 2 : \vec{p}_2 \rangle \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{L^3}} \right)^4 \int \int d^3r_1 d^3r_2 e^{i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3)\cdot\mathbf{r}_1} e^{i(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_4)\cdot\mathbf{r}_2} v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \end{aligned} \quad (2.49)$$

L'intégrale s'effectue simplement en passant aux variables liées au centre de masse et au mouvement relatif :

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (2.50)$$

L'intégrale sur \mathbf{R} se simplifie en :

$$\int d^3 R e^{i(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4) \cdot \mathbf{R} / \hbar} = L^3 \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4) \quad (2.51)$$

où $\delta(\mathbf{p}) = 1$ si $\mathbf{p} = 0$ et 0 si $\mathbf{p} \neq 0$. Ceci exprime la conservation lors de l'impulsion : les particules avec l'impulsion \mathbf{p}_1 et \mathbf{p}_2 disparaissent et elles sont remplacées par deux particules d'impulsion \mathbf{p}_3 et \mathbf{p}_4 , avec $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4$. En posant $\mathbf{q} = \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_4$, l'intégrale sur \mathbf{r} fait apparaître la transformée de Fourier du potentiel d'interaction $v(\mathbf{r})$:

$$\tilde{v}(\mathbf{q}) = \int d^3 r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} / \hbar} v(\mathbf{r}) = \frac{4\pi\hbar}{q} \int_0^\infty r \sin(qr/\hbar) v(r) dr \quad (2.52)$$

L'expression recherchée est donc :

$$V = \frac{1}{2L^3} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{q}} \tilde{v}(q) a_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{p}_2 - \mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_1} \quad (2.53)$$

Son sens physique est bien clair : on somme sur toutes les impulsions $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ présentes dans le système. Ces atomes subissent une collision dans laquelle la quantité de mouvement \mathbf{q} est transférée entre les deux particules, l'amplitude de probabilité pour qu'un transfert de module q survienne étant proportionnelle à la transformée de Fourier du potentiel d'interaction à la valeur q .

A basse température, les impulsions \mathbf{q} qui contribuent de manière significative ont un module petit ($\bar{q}^2 \sim mk_B T$). Quand ce module moyen \bar{q} est tel que $\bar{q}b \ll 1$, où b est la portée du potentiel, l'élément de matrice $\tilde{v}(q)$ ne dépend pratiquement plus de q , et on peut le remplacer par $\tilde{v}(0)$:

$$V = \frac{\tilde{v}(0)}{2L^3} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{q}} a_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{p}_2 - \mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_1} \quad (2.54)$$

Cette approximation, dite approximation de Born à basse température, revient à traiter le potentiel $v(\mathbf{r})$ comme un potentiel de contact, $v(\mathbf{r}) = g \delta(\mathbf{r})$, avec $g = \tilde{v}(0)$.

Cette approximation de $v(\mathbf{r})$ en potentiel de contact $g \delta(\mathbf{r})$ se généralise au cas de potentiels non réguliers en $\mathbf{r} = 0$, ou encore au cas de potentiels trop forts pour que l'on puisse remplacer "froidement" $\tilde{v}(q)$ par $\tilde{v}(0)$. La quantité g est alors donnée par $g = 4\pi\hbar^2 a/m$, où a est la *longueur de diffusion* du potentiel (voir par exemple K. Huang, *Statistical Physics*).

2.2.3 Utilisation de l'opérateur champ

L'opérateur champ introduit dans la section précédente permet de donner une expression très agréable des opérateurs en seconde quantification.

Commençons par déterminer l'opérateur densité moyenne en un point \mathbf{r}_0 . Dans l'espace à une particule, cet opérateur est simplement $|\mathbf{r}_0\rangle\langle\mathbf{r}_0|$. Le passage à la seconde quantification se fait suivant la règle trouvée ci-dessus pour donner :

$$\rho(\mathbf{r}_0) = \sum_{\alpha, \beta} \langle\beta|\mathbf{r}_0\rangle\langle\mathbf{r}_0|\alpha\rangle a_\beta^\dagger a_\alpha = \sum_{\alpha, \beta} \beta^*(\mathbf{r}_0) \alpha(\mathbf{r}_0) a_\beta^\dagger a_\alpha \quad (2.55)$$

soit :

$$\rho(\mathbf{r}_0) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}_0)\Psi(\mathbf{r}_0) \quad (2.56)$$

L'opérateur nombre de particules, déterminé en (2.24), peut alors se réécrire :

$$\hat{N} = \int d^3r \rho(\mathbf{r}) = \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) \quad (2.57)$$

Plus généralement, les opérateurs à une particule peuvent se mettre sous la forme :

$$\sum_{i=1}^N v(\mathbf{r}_i) \longrightarrow \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r})v(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) \quad (2.58)$$

pour les observables type “énergie potentielle” et

$$\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} \longrightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \nabla\Psi^\dagger(\mathbf{r})\cdot\vec{\nabla}\Psi(\mathbf{r}) \quad (2.59)$$

pour l'observable énergie cinétique. La démonstration de ces deux identités, très simple, est laissée en exercice au lecteur.

En ce qui concerne les opérateurs à deux particules, on trouve de même :

$$\sum_{i,j(i\neq j)} v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \longrightarrow \int \int d^3r d^3r' \Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi^\dagger(\mathbf{r}')v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}) \quad (2.60)$$

Ainsi pour le potentiel de contact $g \delta(\mathbf{r})$, on a

$$\sum_{i,j(i\neq j)} v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \longrightarrow g \int d^3r \left(\Psi^\dagger(\mathbf{r})\right)^2 (\Psi(\mathbf{r}))^2$$

Un opérateur à deux particules souvent utile pour caractériser la répartition des particules au sein d'un milieu matériel est l'opérateur “corrélacion en position”, dont la valeur moyenne donne la probabilité de mesurer une particule au point \mathbf{r} et une autre au point \mathbf{r}' . Cet opérateur se déduit de l'opérateur à deux particules $|1 : \mathbf{r}; 2 : \mathbf{r}'\rangle\langle 1 : \mathbf{r}; 2 : \mathbf{r}'|$ et on trouve :

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi^\dagger(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}) \quad (2.61)$$

A titre d'exemple, on a représenté sur la figure (2.1) la variation de $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')/\rho_0^2$ avec la distance $r'' = |\vec{r} - \mathbf{r}'|$ pour un gaz parfait de bosons et de fermions polarisés, de densité ρ_0 , à différentes températures². A température nulle, la fonction de corrélacion pour les fermions présente un trou en $r'' = 0$, dû au principe de Pauli : il est impossible de trouver deux fermions au même endroit ! La largeur typique du trou est \hbar/p_F où $p_F = \sqrt{2mE_F}$ est l'impulsion de Fermi. Pour des bosons à température nulle, la fonction de corrélacion est plate ; tous les bosons sont dans l'état $\mathbf{p} = 0$ et il n'y a pas de corrélacion entre eux. Ces corrélacions apparaissent à plus haute température. Au-dessus de la température de condensation de Bose-Einstein, la fonction de corrélacion vaut 2 en $r'' = 0$, puis décroît vers 1 sur une distance donnée par la longueur d'onde thermique $\Lambda_{dB} = h/\sqrt{2\pi mkT}$. Les lecteurs opticiens pourront rapprocher ce comportement de l'effet de groupement de photons dans une source lumineuse thermique (effet Hanbury-Brown et Twiss³), un laser monochromatique étant quant à lui très proche d'un gaz de Bose à température nulle.

²Cette figure est tirée de la thèse de doctorat d'O. Morice, Paris, 1995.

³R. Hanbury-Brown and R.Q. Twiss, Nature **177**, 27 (1956).

FIG. 2.1 – Variation avec $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ de la fonction de corrélation normalisée $\langle \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rangle / \rho_0^2$, pour un gaz parfait de Bose ou de Fermi.

2.3 Lien avec la théorie des champs

La définition des opérateurs a_μ, a_μ^\dagger a été guidée par le souci de simplifier au maximum dans ce formalisme les expressions des opérateurs comme F ou G . Deux questions restent néanmoins en suspens. Tout d’abord le lecteur aura sûrement noté l’analogie formelle entre ces opérateurs a_μ, a_μ^\dagger et ceux qui interviennent dans la quantification du mouvement d’un oscillateur harmonique; cette analogie est-elle fortuite? Ensuite l’appellation “seconde quantification” pour la procédure que nous avons suivie est pour le moins mystérieuse. Pour éclaircir ces deux points, commençons par un léger détour, qui consiste à déterminer l’évolution temporelle des opérateurs création-annihilation et de l’opérateur champ.

2.3.1 Evolution temporelle de l’opérateur champ

Considérons un système de particules indépendantes en mouvement dans un potentiel $V(\mathbf{r})$. L’hamiltonien à une particule s’écrit donc :

$$h = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (2.62)$$

On note comme précédemment $|\alpha\rangle$ les états propres de cet hamiltonien et $\hbar\omega_\alpha$ les énergies propres associées :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \alpha(\mathbf{r}) = \hbar\omega_\alpha \alpha(\mathbf{r}) \quad (2.63)$$

L’hamiltonien en seconde quantification est donc :

$$H = \sum_{\alpha} \hbar\omega_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \quad (2.64)$$

Plaçons nous en point de vue de Heisenberg et regardons successivement l’évolution d’un a_α donné, puis de l’opérateur champ $\Psi(\vec{r})$. On a tout d’abord :

$$\dot{a}_\alpha = \frac{i}{\hbar} [H, a_\alpha] = i \sum_{\beta} \omega_\beta [a_\beta^\dagger a_\beta, a_\alpha] = i\omega_\alpha [a_\alpha^\dagger a_\alpha, a_\alpha] = -i\omega_\alpha a_\alpha \quad (2.65)$$

Cette relation est valable que l’on ait à faire à des bosons ou des fermions.

Pour l'opérateur champ $\Psi(\mathbf{r})$, on trouve alors :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = \sum \alpha(\mathbf{r}) \dot{a}_\alpha = -i \sum_\alpha \alpha(\mathbf{r}) \omega_\alpha a_\alpha \quad (2.66)$$

On remplace maintenant $\omega_\alpha \alpha(\mathbf{r})$ par sa valeur tirée de (2.63) :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_\alpha \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \alpha(\mathbf{r}) a_\alpha \quad (2.67)$$

ou encore :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.68)$$

On trouve donc que l'opérateur champ satisfait une équation formellement identique à l'équation de Schrödinger à une particule. Il ne faut toutefois pas confondre les deux points de vue. Dans l'équation de Schrödinger traditionnelle, $\psi(\mathbf{r})$ est une fonction à valeurs complexes ; au contraire, l'équation trouvée ici porte sur un opérateur.

Néanmoins la similarité entre l'équation de Schrödinger et (2.68) est profonde. L'équation (2.68) aurait pu être obtenue à partir de l'équation de Schrödinger considérée comme décrivant l'évolution d'un champ classique, au même titre que les équations de Maxwell décrivent l'évolution des champs classiques \mathbf{E} et \mathbf{B} . Ce champ de Schrödinger ψ , ou les champs \mathbf{E} et \mathbf{B} , sont ensuite quantifiés et le résultat est un opérateur champ de Schrödinger (*i.e.* l'opérateur Ψ obtenu ci-dessus, satisfaisant (2.68)) ou des opérateurs $\hat{\mathbf{E}}$ et $\hat{\mathbf{B}}$. La procédure générale pour la quantification d'un champ sort du cadre de ce cours. Elle sera présentée en détail dans le cours d'A. Comtet⁴. A titre d'exemple, nous présentons dans le paragraphe suivant les grandes lignes de cette quantification pour le champ scalaire décrivant les vibrations d'une corde vibrante.

2.3.2 Quantification du mouvement d'une corde vibrante

Considérons une corde de longueur L , de tension τ et de masse linéique ρ . Cette corde, tendue le long de l'axe Oz , peut vibrer dans le plan xOz ; on se limite ici aux petits écarts par rapport à l'axe Oz (figure 2.2). L'état de la corde à un instant donné est caractérisé par la fonction $x(z, t)$, qui est un champ scalaire à une dimension. L'angle de la tangente à la corde avec l'axe Oz est :

$$\alpha(z, t) = \frac{\partial x}{\partial z} \quad (2.69)$$

et on suppose $\alpha(z, t) \ll 1$. La relation fondamentale de la dynamique appliquée à un élément centré en z et de longueur δz donne :

$$\rho \delta z \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = \tau \left(\alpha(z + \delta z, t) - \alpha\left(z - \frac{\delta z}{2}, t\right) \right) = \tau \delta z \frac{\partial \alpha}{\partial z} \quad (2.70)$$

On en déduit l'équation d'onde :

$$\rho \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = \tau \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} \quad (2.71)$$

correspondant à une vitesse de propagation $c = \sqrt{\tau/\rho}$.

⁴Pour la quantification du champ de Schrödinger, un peu délicate, on pourra consulter le livre de L. Schiff, Quantum Mechanics.

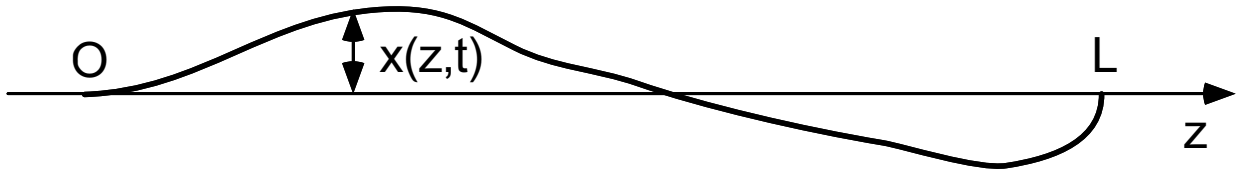


FIG. 2.2 – Mouvement d'une corde vibrante.

On peut identifier l'énergie cinétique et l'énergie potentielle de la corde vibrante. L'énergie cinétique de l'élément δz considéré plus haut vaut $\frac{1}{2}\rho\delta z\left(\frac{\partial x}{\partial t}\right)^2$; l'énergie cinétique totale est donc :

$$E_c(t) = \frac{\rho}{2} \int_0^L \left(\frac{\partial x}{\partial t}\right)^2 dz \quad (2.72)$$

L'énergie potentielle se calcule à partir de l'allongement de la corde :

$$E_p(t) = \tau\Delta L = \tau \int_0^L \sqrt{1 + \alpha^2(z,t)} dz \quad - \quad \tau L \simeq \frac{\tau}{2} \int_0^L \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)^2 dz \quad (2.73)$$

Pour quantifier ce mouvement selon les règles, il faudrait déterminer la densité de Lagrangien du système et identifier les variables canoniques. Cette procédure sera présentée avec toute la rigueur qui convient dans le cours de théorie des champs; ici, nous nous contenterons de travailler par analogie, en montrant l'équivalence entre le mouvement de la corde et celui d'une assemblée d'oscillateurs harmoniques indépendants. Pour cela, décomposons le mouvement de la corde selon ses modes propres :

$$x(z,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_k \sin(kz) X_k(t) \quad (2.74)$$

Les conditions aux limites $x(0,t) = x(L,t) = 0$ imposent kL/π entier positif. La vitesse de la corde au point z s'écrit :

$$v(z,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_k \sin(kz) V_k(t) \quad (2.75)$$

avec :

$$V_k(t) = \dot{X}_k(t) \quad (2.76)$$

L'équation du mouvement de la corde est avec ces notations :

$$\rho\dot{V}_k(t) = -\tau k^2 X_k(t) \quad (2.77)$$

On voit comme annoncé que la dynamique de la corde se ramène au mouvement d'une assemblée infinie d'oscillateurs harmoniques indépendants; à chaque mode k de vibration de la corde est associé un oscillateur de fréquence $\omega_k = ck$. Cette interprétation se confirme quand on exprime les énergies cinétique et potentielles en fonction des X_k et des V_k :

$$E_c = \frac{\rho}{2} \int_0^L \frac{2}{L} \sum_{k,k'} \sin kz \sin k'z V_k(t)V_{k'}(t) = \frac{\rho}{2} \sum_k V_k^2(t) \quad (2.78)$$

$$E_p = \frac{\tau}{2} \int_0^L \frac{2}{L} \sum_{k,k'} kk' \cos kz \cos k'z X_k(t)X_{k'}(t) = \frac{\tau}{2} \sum_k k^2 X_k^2(t) \quad (2.79)$$

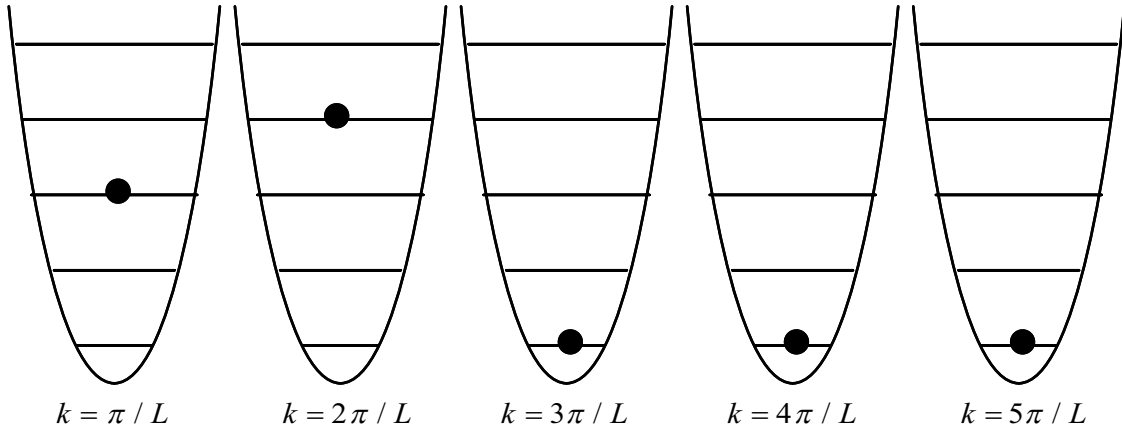


FIG. 2.3 – Représentation de l'état de la corde vibrante ; à chaque mode est associé un oscillateur harmonique quantifié.

soit

$$E = \sum_k \frac{1}{2} \rho V_k^2 + \frac{1}{2} k^2 \tau X_k^2 \quad (2.80)$$

On quantifie alors chaque oscillateur harmonique comme si c'était un oscillateur matériel. On associe au couple "position-impulsion" pour un mode donné (X_k, P_k) (avec $P_k = \rho V_k$) un couple d'opérateurs (\hat{X}_k, \hat{P}_k) tels que $[\hat{X}_k, \hat{P}_{k'}] = i\hbar \delta_{k,k'}$. On introduit ensuite des opérateurs a_k et a_k^\dagger tels que :

$$a_k = \sqrt{\frac{\rho \omega_k}{2\hbar}} \hat{X}_k + i \frac{\hat{P}_k}{\sqrt{2\hbar \rho \omega_k}} \quad (2.81)$$

$$a_k^\dagger = \sqrt{\frac{\rho \omega_k}{2\hbar}} \hat{X}_k - i \frac{\hat{P}_k}{\sqrt{2\hbar \rho \omega_k}} \quad (2.82)$$

avec $[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}$. L'hamiltonien du système est

$$H = \sum \hbar \omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right) \quad (2.83)$$

Une base de l'espace des états de la corde s'obtient en considérant les vecteurs correspondant à une excitation donnée pour chaque mode k :

$$|n_{\pi/L}, n_{2\pi/L}, \dots\rangle \quad (2.84)$$

On a par exemple représenté sur la figure 2.3 l'état $|2, 3, 0, \dots\rangle$. L'état fondamental de la corde est donné par $|0, 0, \dots\rangle$. Notons que cet état fondamental a une énergie infinie : $\sum_k \hbar \omega_k / 2$; il faudrait renormaliser notre théorie pour éliminer cet infini non physique.

On constate alors qu'il existe un isomorphisme naturel entre l'espace de Hilbert décrivant l'état de la corde et l'espace de Fock servant à décrire une assemblée de bosons (appelons-les "cordons") enfermés dans un puits carré de taille L et d'énergie $\hbar \omega_k = \hbar c k$, avec kL/π entier non nul. L'état représenté sur la figure 2.3 peut être considéré comme un état à 5 cordons, deux cordons dans l'état $k = \pi/L$ et 3 cordons dans l'état $k = 2\pi/L$. Les opérateurs a_k et a_k^\dagger se réinterprètent comme les opérateurs annihilation et création d'un cordon dans le mode k , ces

cordons ayant un comportement bosonique⁵. Enfin l'opérateur *déformation de la corde* s'obtient à partir de (2.74) :

$$\hat{x}(z, t) = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{\rho\omega_k L}} \sin kz (a_k + a_k^\dagger) \quad (2.85)$$

⁵Pour voir apparaître des champs de fermions, le lecteur devra aborder la seconde quantification de l'équation de Dirac.

Deuxième partie

Problèmes dépendant du temps

Chapitre 3

Amplitudes de transition

Le problème de l'évolution temporelle d'un système quantique est la question la plus naturelle que l'on est amené à se poser pour décrire une observation expérimentale donnée. Etant donné une situation initiale bien définie, quelle est la probabilité pour que l'on observe le système après un certain temps dans tel ou tel état ?

Quand on a su diagonaliser complètement l'Hamiltonien, ce problème a une réponse élémentaire. Notons $|\alpha\rangle$ les vecteurs propres de H et E_α les énergies propres associées. Le vecteur d'état à l'instant t se déduit simplement du vecteur d'état initial par :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} e^{-iE_{\alpha}t/\hbar} |\alpha\rangle \quad \text{avec} \quad c_{\alpha} = \langle \alpha | \psi(0) \rangle \quad (3.1)$$

Dans la plupart des cas, la situation n'est pas si simple et il faut avoir recours à des approximations. Le but de ce chapitre est de mettre en place un formalisme bien adapté à cette étude approchée de l'évolution temporelle d'un système. On va y dégager en particulier la notion d'amplitude de transition, que l'on retrouve par exemple lorsque l'on étudie la désexcitation d'un niveau instable (atomique, nucléaire,...). Cette notion est également essentielle en théorie des collisions, où l'on cherche à caractériser la probabilité qu'une particule d'impulsion initiale \mathbf{p}_i se retrouve avec l'impulsion finale \mathbf{p}_f après diffusion par un potentiel. Pour déterminer ces amplitudes de transition, on utilise l'opérateur d'évolution $U(t)$ ou sa "transformée de Fourier", la résolvante $G(z)$.

3.1 L'opérateur d'évolution

La définition générale de l'opérateur d'évolution $U(t_f, t_i)$, d'un instant t_i vers un instant t_f , pour un système dont l'Hamiltonien peut éventuellement dépendre du temps, est donnée par :

$$U(t_i, t_i) = 1 \quad (3.2)$$

$$i\hbar \frac{\partial U(t_f, t_i)}{\partial t_f} = H(t_f) U(t_f, t_i) \quad (3.3)$$

Il est alors immédiat de vérifier que :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_i) |\psi(t_i)\rangle \quad (3.4)$$

est solution de l'équation de Schrödinger $i\hbar|\dot{\psi}(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$. L'amplitude de transition d'un état ψ_i à l'instant t_i vers un état ψ_f à l'instant t_f est donnée par :

$$a(\psi_i, t_i \rightarrow \psi_f, t_f) = \langle \psi_f | U(t_f, t_i) | \psi_i \rangle \quad (3.5)$$

De cette définition découlent immédiatement les propriétés suivantes :

1. Si H est indépendant du temps, alors

$$U(t_f, t_i) = \exp(-iH(t_f - t_i)/\hbar) \quad (3.6)$$

que l'on note plus simplement $U(t_f - t_i)$.

2. L'Hamiltonien H est hermitien, donc U est unitaire.
3. On a, quel que soit l'instant relai t_r :

$$U(t_f, t_i) = U(t_f, t_r)U(t_r, t_i) \quad (3.7)$$

Cette égalité conduit à la notion d'interférence entre amplitudes de probabilité, puisque qu'elle entraîne, en introduisant une relation de fermeture :

$$a(\psi_i, t_i \rightarrow \psi_f, t_f) = \sum_{\psi_r} a(\psi_i, t_i \rightarrow \psi_r, t_r) a(\psi_r, t_r \rightarrow \psi_f, t_f) \quad (3.8)$$

4. $U^\dagger(t_f, t_i) = U(t_i, t_f)$
5. $i\hbar \frac{\partial U(t_f, t_i)}{\partial t_i} = -U(t_f, t_i)H(t_i)$

3.2 L'opérateur résolvante

3.2.1 Définition

On considère dans cette partie un système isolé, dont l'Hamiltonien est donc indépendant du temps. On pose :

$$G(z) = \frac{1}{z - H} \quad (3.9)$$

où z est un nombre complexe. En d'autres termes, $G(z)$ agit sur la base propre de H par :

$$G(z)|\alpha\rangle = \frac{1}{z - E_\alpha} |\alpha\rangle \quad (3.10)$$

L'opérateur $G(z)$ est donc défini pour tout z non égal à une valeur propre de H . La forme habituelle du spectre de H est indiquée sur la figure 3.1. Il comporte certaines valeurs discrètes, qui correspondent à des pôles de $G(z)$, et un continuum, qui correspond à une coupure dans la définition de $G(z)$. Il est alors utile de définir la limite de $G(z)$ de part et d'autre de la coupure :

$$G_+(E) = \frac{1}{E - H + i\eta} \quad G_-(E) = \frac{1}{E - H - i\eta} \quad (3.11)$$

où E est un nombre réel et où il faut prendre $\eta \rightarrow 0_+$. Considérons par exemple l'action de $G_\pm(E)$ sur un état propre $|\alpha\rangle$ de H . Cette limite se prend en utilisant la formule habituelle :

$$\frac{1}{E - E_\alpha \pm i\eta} = \mathcal{PP} \left(\frac{1}{E - E_\alpha} \right) \mp i\pi\delta(E - E_\alpha) \quad (3.12)$$

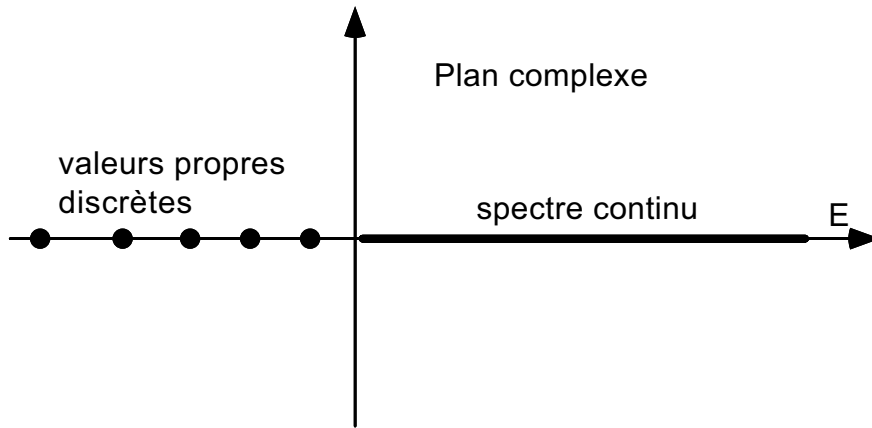


FIG. 3.1 – Forme typique du spectre de H , situé sur l'axe réel, correspondant aux points où la résolvante $G(z)$ n'est pas définie.

3.2.2 Lien entre $G(z)$ et $U(t)$

L'intérêt de $G(z)$ réside dans sa structure mathématique très simple, qui permet de faire de multiples développements perturbatifs, comme nous le verrons dans le paragraphe suivant. Une fois $G(z)$ connue, le retour vers $U(t)$ se fait simplement par la formule :

$$U(t) = \frac{1}{2i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iEt/\hbar} (G_-(E) - G_+(E)) dE \quad (3.13)$$

Cette formule se démontre en regardant l'action des deux membres sur un état propre $|\alpha\rangle$ de H . A gauche, on trouve simplement $\exp(-iE_\alpha t/\hbar)|\alpha\rangle$. A droite, on fait apparaître :

$$\frac{1}{2i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iEt/\hbar} \left(\frac{1}{E - E_\alpha - i\eta} - \frac{1}{E - E_\alpha + i\eta} \right) dE |\alpha\rangle \quad (3.14)$$

On utilise la technique habituelle d'intégration dans le plan complexe. Pour $t < 0$, il faut utiliser un contour longeant l'axe réel et fermé vers le haut du plan complexe (figure 3.2) ; c'est alors $G_-(E)$ qui contribue, puisque son pôle est situé en $E = E_\alpha + i\eta$. Le résidu correspondant est $2i\pi \exp(-iE_\alpha t/\hbar)$. Pour $t > 0$, c'est le pôle de $G_+(E)$, situé en $E = E_\alpha - i\eta$ qui contribue, puisque le contour à considérer longe l'axe réel puis se ferme par le bas du plan complexe. Le résidu est alors $-2i\pi \exp(-iE_\alpha t/\hbar)$, ce qui, compte tenu du signe $-$ devant $G_+(E)$, donne bien le résultat cherché.

3.2.3 Développement de l'opérateur résolvante

La structure mathématique de la résolvante $G(z)$ se prête bien à des développements perturbatifs, et c'est ce qui justifie son utilisation pour des problèmes très variés. Considérons par exemple un Hamiltonien du type

$$H = H_0 + V \quad (3.15)$$

pour lequel on souhaite exprimer les amplitudes de transition en puissances de V , sachant que l'on peut diagonaliser exactement H_0 .

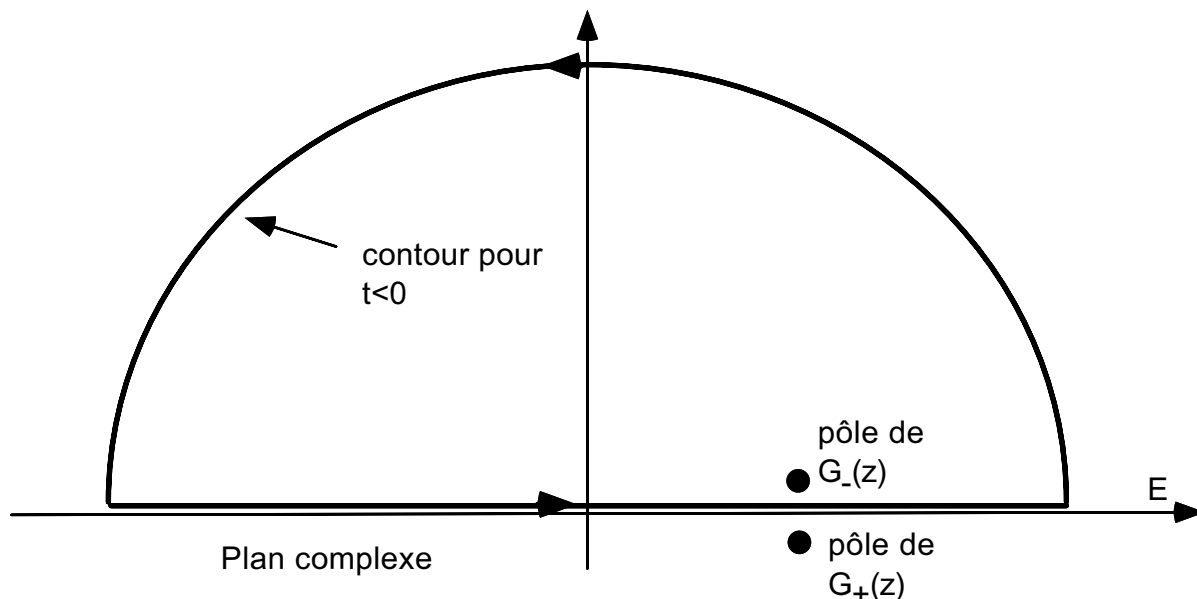


FIG. 3.2 – Contours à utiliser pour établir la relation entre $G_{\pm}(E)$ et $U(t)$.

On utilise l'identité entre opérateurs :

$$\frac{1}{A} - \frac{1}{B} = \frac{1}{A}(B - A)\frac{1}{B} = \frac{1}{B}(B - A)\frac{1}{A} \quad (3.16)$$

qui donne, en posant $A = z - H$ et $B = z - H_0$:

$$G(z) = G_0(z) + G(z)VG_0(z) = G_0(z) + G_0(z)VG(z) \quad (3.17)$$

avec

$$G_0(z) = \frac{1}{z - H_0} \quad (3.18)$$

Ces deux égalités sont le point de départ pour un développement de $G(z)$ (inconnue) en fonction de puissances de $G_0(z)$ et V (supposés connus). On trouve ainsi :

$$G = G_0 + G_0VG_0 + \dots + (G_0V)^n G_0 + \dots \quad (3.19)$$

développement que l'on peut tronquer de manière exacte en remplaçant dans le dernier terme de la somme de droite un des G_0 par G ; par exemple :

$$G = G_0 + G_0VG_0 + G_0VGVG_0 \quad (3.20)$$

Nous aurons l'occasion d'utiliser ce type de développement dans les chapitres suivants.

Chapitre 4

Couplage d'un état discret à un continuum

Pour le problème élémentaire de l'évolution temporelle d'un système à deux niveaux a et b , d'énergie E_a et E_b , ces deux niveaux étant couplés par un potentiel d'élément de matrice V_{ab} , la probabilité pour passer de a en b en un temps t se calcule exactement :

$$P_{ab}(t) = \frac{4|V_{ab}|^2}{(E_a - E_b)^2 + 4|V_{ab}|^2} \sin^2 \left(\frac{t\sqrt{(E_a - E_b)^2 + 4|V_{ab}|^2}}{2\hbar} \right) \quad (4.1)$$

C'est la formule de Rabi, démontrée au premier chapitre de cette partie.

Pour de multiples problèmes, cette quantité n'est pas pertinente. On mesure plutôt la probabilité de passer d'un état initial i à un domaine \mathcal{D}_f d'états finals f , ces états finals représentant un continuum. Par exemple, dans un problème d'émission spontanée, l'état i représente l'atome ou le noyau dans un état excité, en l'absence de photons, et les états f possibles correspondent à l'atome ou au noyau, en présence d'un (ou plusieurs) photon(s). Les états finals sont repérés par l'énergie du photon émis, par sa direction et par sa polarisation ; les deux premières grandeurs peuvent donc prendre un ensemble continu de valeurs correspondant à des états finals orthogonaux.

Nous modéliserons ce problème en partant de l'Hamiltonien H_0 en l'absence de couplage entre l'état discret i et les états finals f . L'état i est état propre de H_0 avec la valeur propre E_i :

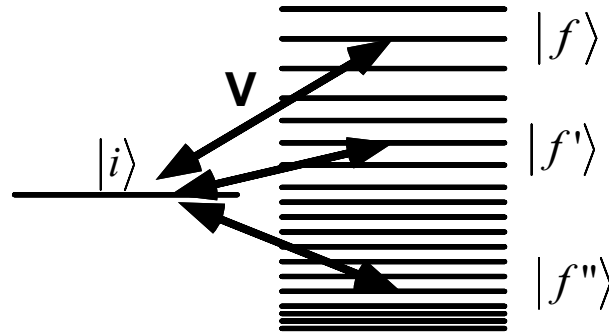
$$H_0|i\rangle = E_i|i\rangle \quad (4.2)$$

Les états finals f sont repérés par deux nombres : $f \equiv (E_f, \xi_f)$; E_f représente leur énergie :

$$H_0|E_f, \xi_f\rangle = E_f|E_f, \xi_f\rangle \quad (4.3)$$

et ξ_f correspond à l'ensemble des nombres quantiques supplémentaires nécessaires pour préciser complètement l'état f . Pour le cas d'un photon, évoqué plus haut, ξ_f repère la direction de propagation et la polarisation de ce photon. Nous supposons que l'état i est couplé aux états f par un potentiel V caractérisé par ses éléments de matrice :

$$V_{fi} = \langle f|V|i\rangle \quad (4.4)$$

FIG. 4.1 – Spectre en énergie de l'hamiltonien non perturbé H_0 .

Pour simplifier le traitement mathématique de ce problème, nous supposons que V n'a pas d'autres éléments de matrice non nuls, c'est-à-dire que :

$$V_{ii} = \langle i|V|i\rangle = 0 \quad V_{ff'} = \langle f|V|f'\rangle = 0 \quad (4.5)$$

La structure des niveaux d'énergie de H_0 est indiquée sur la figure 4.1. et elle est caractérisée par la *densité d'états* $\rho(E_f, \xi_f)$. Cette fonction est telle que $\rho(E_f, \xi_f) dE_f d\xi_f$ est le nombre d'états f d'énergie comprise entre E_f et $E_f + dE_f$, et de paramètre ξ compris entre ξ_f et $\xi_f + d\xi_f$.

4.1 La règle d'or de Fermi

Nous allons dans un premier temps évaluer la probabilité d'atteindre un domaine donné d'états finals \mathcal{D}_f pour les temps "courts". L'échelle de temps caractéristique sur laquelle ce traitement est valable sera déterminée de manière auto-cohérente à la fin de ce paragraphe.

4.1.1 Equation de Schrödinger

La fonction d'onde à l'instant initial est :

$$|\psi(0)\rangle = |i\rangle \quad (4.6)$$

A l'instant t , elle s'écrit :

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t)|i\rangle + \sum_f \beta_f(t)|f\rangle \quad (4.7)$$

L'évolution des coefficients α et β_f est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\alpha} &= E_i\alpha + \sum_f V_{if}\beta_f \\ i\hbar\dot{\beta}_f &= E_f\beta_f + V_{fi}\alpha \end{aligned}$$

Pour préparer le traitement perturbatif de V , définissons de nouvelles fonctions inconnues $\tilde{\alpha}$ et $\tilde{\beta}_f$ n'évoluant que sous l'effet du couplage :

$$\tilde{\alpha}(t) = \alpha(t)e^{iE_it/\hbar} \quad \tilde{\beta}_f(t) = \beta_f(t)e^{iE_ft/\hbar} \quad (4.8)$$

L'équation de Schrödinger se réécrit alors :

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\tilde{\alpha}} &= \sum_f V_{if} \tilde{\beta}_f e^{i\omega_{if}t} \\ i\hbar \dot{\tilde{\beta}}_f &= V_{fi} \tilde{\alpha} e^{-i\omega_{if}t} \end{aligned}$$

où l'on a posé $\omega_{if} = (E_i - E_f)/\hbar$.

4.1.2 Résolution perturbative

A l'ordre 0 en V , les fonctions $\tilde{\alpha}$ et $\tilde{\beta}_f$ n'évoluent pas. A l'ordre 1 en V , on peut donc remplacer dans (4.9) $\tilde{\alpha}(t)$ par sa valeur initiale égale à 1 :

$$i\hbar \dot{\tilde{\beta}}_f \simeq V_{fi} e^{-i\omega_{if}t} \quad (4.9)$$

ce qui s'intègre en :

$$\tilde{\beta}_f(t) \simeq \frac{V_{fi}}{\hbar\omega_{if}} (e^{-i\omega_{if}t} - 1) \quad (4.10)$$

On calcule alors la probabilité $\delta P_f(t)$ de trouver le système dans le domaine d'états finals \mathcal{D}_f :

$$\delta P_f(t) = \sum_{f \in \mathcal{D}_f} |\beta_f(t)|^2 = \sum_{f \in \mathcal{D}_f} \frac{4|V_{fi}|^2}{(\hbar\omega_{if})^2} \sin^2 \frac{\omega_{if}t}{2} \quad (4.11)$$

4.1.3 Définition d'une probabilité par unité de temps

Dans le résultat pour $\delta P_f(t)$ apparaît une quantité proportionnelle au carré de la fonction :

$$\delta^{(t)}(E_f - E_i) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin((E_f - E_i)t/2\hbar)}{E_f - E_i} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-t/2}^{+t/2} e^{i(E_f - E_i)t'/\hbar} dt' \quad (4.12)$$

Cette fonction $\delta^{(t)}(E)$ est paire et son intégrale sur E est égale à 1 puisque :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin u}{u} du = \pi \quad (4.13)$$

Elle ne prend des valeurs significativement différentes de 0 que pour $|E| \leq \hbar/t$ et elle tend vers la distribution de Dirac $\delta(E)$ quand t tend vers l'infini. On peut alors écrire l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution entre $|i\rangle$ et $|f\rangle$ à l'aide de $\delta^{(t)}(E)$:

$$\beta_f(t) = \langle f|U(t)|i\rangle = -2i\pi V_{fi} e^{-i(E_i + E_f)t/(2\hbar)} \delta^{(t)}(E_f - E_i) \quad (4.14)$$

Dans (4.11), c'est plutôt le carré de $\delta^{(t)}(E)$ qui intervient. Ce carré peut se mettre sous la forme :

$$\left(\delta^{(t)}(E_f - E_i) \right)^2 = \frac{t}{2\pi\hbar} \bar{\delta}^{(t)}(E_f - E_i) \quad (4.15)$$

où l'on a posé :

$$\bar{\delta}^{(t)}(E_f - E_i) = \frac{1}{\pi} \frac{2\hbar \sin^2((E_f - E_i)t/2\hbar)}{t (E_f - E_i)^2} \quad (4.16)$$

Tout comme $\delta^{(t)}(E)$, cette nouvelle fonction $\bar{\delta}^{(t)}(E)$ est paire et d'intégrale égale à 1 puisque :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 u}{u^2} du = \pi \quad (4.17)$$

Elle tend également vers la distribution de Dirac $\delta(E)$ quand t tend vers l'infini.

En utilisant cette nouvelle fonction, on peut mettre $\delta P_f(t)$ sous la forme :

$$\delta P_f(t) = \frac{2\pi}{\hbar} t \sum_{f \in \mathcal{D}_f} |V_{fi}|^2 \bar{\delta}^{(t)}(E_f - E_i) \quad (4.18)$$

ou encore, en remplaçant la somme par une intégrale et en introduisant la densité d'états $\rho(E_f, \xi_f)$:

$$\delta P_f(t) = \frac{2\pi}{\hbar} t \int_{f \in \mathcal{D}_f} |V_{fi}|^2 \bar{\delta}^{(t)}(E_f - E_i) \rho(E_f, \xi_f) df \quad (4.19)$$

Supposons que le temps t dans (4.19) soit suffisamment grand pour qu'il soit légitime de remplacer $\bar{\delta}^{(t)}(E_f - E_i)$ par la distribution de Dirac $\delta(E_f - E_i)$; la validité de cette approximation sera discutée dans le paragraphe qui suit. Si $|V_{fi}|^2 \rho(E_f, \xi_f)$ varie peu sur l'extension $\delta \xi_f$ du domaine \mathcal{D}_f considéré, on trouve alors :

$$\delta P_f(t) = \frac{2\pi}{\hbar} t |V_{fi}|^2 \rho(E_f = E_i, \xi_f) \delta \xi_f \quad (4.20)$$

On en déduit que la probabilité d'atteindre le domaine \mathcal{D}_f croît linéairement avec le temps, ce qui conduit à la définition d'une probabilité par unité de temps et par unité de paramètre ξ_f :

$$\frac{\delta w}{\delta \xi_f} = \frac{1}{t} \frac{\delta P_f(t)}{\delta \xi_f} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \rho(E_f = E_i, \xi_f) \quad (4.21)$$

Ce résultat est connu sous le nom de règle d'or de Fermi, que l'on utilise également sous la forme d'une somme discrète :

$$\delta w = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{f \in \mathcal{D}_f} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (4.22)$$

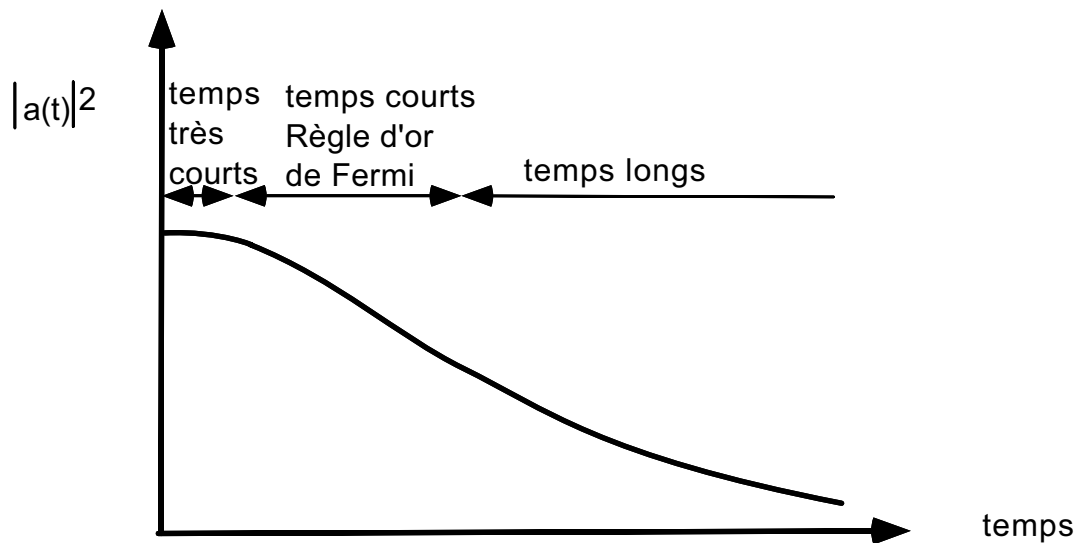
On déduit de cette probabilité par unité de temps que la probabilité de présence dans l'état initial $|\alpha(t)|^2$ diminue linéairement avec le temps :

$$|\alpha(t)|^2 = 1 - \Gamma t \quad (4.23)$$

Le taux de départ de l'état initial s'écrit :

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (4.24)$$

où la somme porte cette fois sur tous les états finals f possibles.

FIG. 4.2 – Evolution temporelle de la probabilité de présence dans l'état i .

4.1.4 Validité du traitement perturbatif

Deux approximations différentes ont été nécessaires pour arriver à la règle d'or de Fermi. Ces deux approximations mettent des contraintes différentes sur le domaine temporel pour lequel le résultat (4.21) est valable. Tout d'abord, nous avons remplacé dans les équations de départ $\tilde{\alpha}(t)$ par 1. Il faut donc que $|\alpha(t)|$ évolue peu pendant le temps t , c'est-à-dire :

$$\Gamma t \ll 1 \quad (4.25)$$

Par ailleurs nous avons remplacé la fonction $\bar{\delta}^{(t)}(E)$ par la distribution de Dirac $\delta(E)$. Ceci est valable si $\bar{\delta}^{(t)}(E)$, qui a pour largeur en énergie \hbar/t , est multipliée par une fonction de E variant très lentement à l'échelle de \hbar/t . La fonction en question est $|V_{fi}|^2 \rho(E_f, \xi_f)$; notons $\hbar\kappa$ sa largeur en énergie. Il faut donc :

$$\hbar/t \ll \hbar\kappa \quad (4.26)$$

En oubliant les facteurs 2π , nous aboutissons finalement à la double contrainte sur le temps (figure 4.2) :

$$\frac{1}{\kappa} \ll t \ll \frac{1}{\Gamma} \quad (4.27)$$

qui ne peut être satisfaite que si :

$$\Gamma \ll \kappa \quad (4.28)$$

Cette dernière inégalité doit être comprise comme une condition auto-cohérente sur la méthode suivie. Pour un problème donné, κ est fixée. On calcule Γ par la formule (4.24) et on doit alors vérifier que (4.28) est vérifiée. Si c'est le cas, il existe une gamme de temps, donnée par (4.27), pour laquelle la règle d'or de Fermi s'applique. Si ce n'est pas le cas, cela signifie que ce problème ne peut pas être abordé par le traitement perturbatif que nous venons de présenter.

4.2 Exemples d'application

4.2.1 Le calcul de la densités d'états

Il s'agit d'un calcul que l'on retrouve dans de nombreux problèmes. Décrivons ici les deux cas standards de particules libres dans une boîte de volume L^3 , ces particules étant soit non relativistes, soit ultra-relativistes. Dans les deux cas, on sait que l'on peut repérer l'état de la particule (supposée ici sans spin) par son vecteur d'onde \mathbf{k} . Pour des conditions aux limites périodiques, ce vecteur d'onde doit être tel que :

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i \quad i = x, y, z \quad (4.29)$$

où n_x, n_y, n_z sont des entiers. Pour un volume élémentaire d^3k donné dans l'espace des \mathbf{k} , il y a donc :

$$d^3n = \frac{L^3}{8\pi^3} d^3k = \frac{L^3}{8\pi^3} k^2 dk d^2\Omega \quad (4.30)$$

états possibles, Ω repérant l'angle solide dans lequel pointe \mathbf{k} ; cette variable correspond au paramètre ξ_f que nous avons introduit pour préciser complètement un état $|f\rangle$. Il s'agit maintenant de relier le volume élémentaire d^3k à l'intervalle élémentaire en énergie dE .

Particules non relativistes

On a la relation de dispersion :

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4.31)$$

soit :

$$dE = \frac{\hbar^2}{m} k dk \implies dk = \frac{m}{\hbar^2} \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} dE \quad (4.32)$$

On a donc :

$$d^3n = \frac{mL^3}{8\pi^3\hbar^3} \sqrt{2mE} dE d^2\Omega \quad (4.33)$$

soit :

$$\rho(E, \Omega) = \frac{d^3n}{dE d^2\Omega} = \frac{mL^3}{8\pi^3\hbar^3} \sqrt{2mE} \quad (4.34)$$

Cette densité d'état en \sqrt{E} est caractéristique de particules libres non relativistes à 3 dimensions.

Particules ultra-relativistes ou photons

La relation de dispersion est alors :

$$E = cp = \hbar ck \quad (4.35)$$

et un raisonnement analogue au précédent donne :

$$\rho(E, \Omega) = \frac{L^3}{8\pi^3\hbar^3 c^3} E^2 \quad (4.36)$$

4.2.2 Emission spontanée d'un système à deux niveaux

On considère un système à deux niveaux, notés e et g . L'état e est un état excité, qui est instable. Le système peut passer de e à l'état fondamental g en émettant un photon. L'état fondamental est stable en l'absence de photons. En présence de photons, le système peut passer de g à e en absorbant un photon. On décrit ces deux systèmes *atome+champ* par l'Hamiltonien suivant :

$$H = H_{\text{atome}} + H_{\text{champ}} + V \quad (4.37)$$

avec :

$$H_{\text{atome}} = \hbar\omega_A |e\rangle\langle e| \quad (4.38)$$

Par convention l'énergie de l'état fondamental est choisie nulle. L'Hamiltonien du champ est :

$$H = \sum_{\lambda} \hbar\omega_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \quad (4.39)$$

Le paramètre λ repère à la fois le vecteur d'onde \mathbf{k} associé à un mode du champ électromagnétique ainsi que la polarisation ϵ de ce mode :

$$\lambda \equiv (\mathbf{k}, \epsilon) \quad (4.40)$$

Le couplage entre l'atome et le champ s'écrit, à l'approximation dipolaire électrique (*c.f.* cours de S. Haroche) :

$$V = \left(\sum_{\lambda} v_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} \right) |g\rangle\langle e| + \left(\sum_{\lambda} v_{\lambda}^* a_{\lambda} \right) |e\rangle\langle g| \quad (4.41)$$

Les coefficients v_{λ} ont pour valeur :

$$v_{\lambda} = \langle g; \mathbf{k}, \epsilon | V | e, 0 \rangle = (\mathbf{d} \cdot \epsilon) \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 L^3}} \quad (4.42)$$

où $|0\rangle$ repère l'état à 0 photon du champ électromagnétique ; \mathbf{d} représente le dipole électrique réduit pour la transition atomique ou nucléaire considérée.

Avec les notations du premier paragraphe, on a

$$H_0 = H_{\text{atome}} + H_{\text{champ}} \quad (4.43)$$

L'état initial est $|i\rangle = |e, 0\rangle$, d'énergie propre vis à vis de H_0 : $\hbar\omega_0$; le continuum d'états finals est $|f\rangle = |g, \lambda\rangle$, d'énergie propre vis à vis de H_0 : $\hbar\omega_{\lambda}$.

Le coefficient Γ décrivant le taux de départ de l'état excité est alors donné par :

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\lambda} |v_{\lambda}|^2 \delta(\hbar\omega_A - \hbar\omega_{\lambda}) \quad (4.44)$$

que nous allons maintenant calculer plus explicitement. La probabilité par unité de temps d'émettre un photon d'énergie $\hbar\omega$ et de polarisation ϵ , dans un angle solide $\delta\Omega$, est donnée par :

$$\delta w = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathbf{d} \cdot \epsilon|^2 \frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 L^3} \frac{L^3}{8\pi^3 \hbar^3} \frac{(\hbar\omega)^2}{c^3} \delta\Omega \quad (4.45)$$

cette probabilité devant être évaluée pour $\hbar\omega = \hbar\omega_A$. On a donc :

$$\frac{\delta w}{\delta\Omega} = \frac{\omega_A^3}{8\pi^2\epsilon_0\hbar c^3} |\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\epsilon}|^2 \quad (4.46)$$

L'intégrale sur les angles ne pose pas de problème. Pour une direction de \mathbf{k} donnée, repérée par son angle polaire θ par rapport à l'axe Oz parallèle à \mathbf{d} , on prend comme base de polarisation $\boldsymbol{\epsilon}_1, \boldsymbol{\epsilon}_2$, où $\boldsymbol{\epsilon}_1$ est dans le plan xOy et où $\boldsymbol{\epsilon}_2$ fait un angle $\theta - \pi/2$ avec l'axe Oz . On a donc $\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\epsilon}_1 = 0$ et $|\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\epsilon}_2|^2 = d^2 \sin^2\theta$. L'intégrale angulaire se fait ainsi aisément :

$$\Gamma = \int \int \frac{\delta w}{\delta\Omega} d\Omega = \frac{\omega_A^3 d^2}{8\pi^2\epsilon_0\hbar c^3} \int \int \sin^3\theta d\theta d\phi \quad (4.47)$$

ou encore

$$\Gamma = \frac{\omega_A^3 d^2}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3} \quad (4.48)$$

On voit ainsi que la probabilité d'émission spontanée augmente comme le cube de la fréquence de la transition en jeu ; ceci est une conséquence directe de la densité d'états pour les photons, qui varie comme $(\hbar\omega)^2$. Quasiment négligeable dans le domaine radio-fréquence, elle devient importante pour des transitions situées dans le domaine visible ou ultra-violet. Prenons par exemple le cas de la raie de résonance de l'atome d'hydrogène (transition Lyman α) :

$$2s \longrightarrow 1s + \text{photon} \quad (4.49)$$

La fréquence angulaire ω est de l'ordre de $2 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$, correspondant à une longueur d'onde de 130 nm et à une énergie d'une dizaine d'électron-volt ; la durée de vie est de l'ordre de 2 nanosecondes ($\Gamma = 5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$).

On comprend également que l'on peut modifier ce taux d'émission spontanée de manière importante si l'on place l'atome dans une cavité quasi-résonnante avec la transition $e-g$. Suivant le sens de la modification de la densité d'états, on peut augmenter ou au contraire inhiber l'émission spontanée¹.

Nous pouvons sur cet exemple tester la validité de la règle d'or de Fermi. La fréquence κ typique sur laquelle la fonction $|V_{fi}|^2 \rho(E_f, \xi_f)$ varie est ici $\kappa \sim \omega_A$. Il faut donc pour qu'il existe un domaine temporel sur lequel la règle d'or de Fermi est valable :

$$\Gamma \ll \omega_A \implies \frac{\omega_A^2 d^2}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3} \ll 1 \quad (4.50)$$

Pour un atome on a

$$\hbar\omega_A \sim \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \implies \omega_A d \simeq \omega_A q a_0 \sim \frac{q^3}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \quad (4.51)$$

La condition requise s'écrit alors :

$$\left(\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right)^3 = \alpha^3 \ll 1 \quad (4.52)$$

C'est donc la petitesse de la constante de structure fine α qui assure que le traitement perturbatif à la base de la règle d'or de Fermi peut être valable dans un certain domaine temporel. Si cela n'avait pas été le cas, la seule approche possible à l'émission spontanée de photons par un atome aurait été un traitement non perturbatif, beaucoup plus difficile à mettre en œuvre.

¹Pour une revue des phénomènes d'électro-dynamique en cavité, voir par exemple : S. Haroche et J.-M. Raimond, Scientific American, Avril 1993 ; traduction française dans *Pour la Science*.

4.3 Le comportement aux temps très courts

Aux temps très courts ($\Omega t \leq 1$), le résultat (4.21) n'est pas valable. En utilisant (4.10), on trouve dans cette gamme de temps que

$$\beta_f(t) \sim -\frac{iV_{fi}t}{\hbar} \quad (4.53)$$

ce qui signifie que $\delta P_f(t)$ croît comme t^2 , et que $|\alpha(t)|^2$ décroît comme $1 - \mu t^2$, où μ est une constante que l'on peut déterminer en fonction des paramètres du système.

Ce départ quadratique en temps est inévitable dans une évolution hamiltonienne. Il a des conséquences amusantes comme le paradoxe de Zénon, qui indique que l'on peut empêcher un système d'évoluer en l'observant trop fréquemment. Pour montrer ce paradoxe, considérons simplement un système à deux niveaux a et b . Initialement, le système est dans l'état a et on suppose qu'un potentiel de couplage tend à le faire osciller entre a et b (formule de Rabi). Faisons une mesure après un temps t court devant la fréquence d'oscillation Ω entre a et b . Les probabilités de trouver le système dans les états a et b sont :

$$P_a(t) = 1 - (\Omega t)^2 \quad P_b(t) = (\Omega t)^2 \quad (4.54)$$

Supposons maintenant que l'on fasse une mesure à l'instant $t/2$, puis une mesure à l'instant t . Quelle est la probabilité de trouver le système dans l'état b à l'une ou l'autre de ces mesures ? A l'instant $t/2$, on a les probabilités :

$$P_a(t/2) = 1 - \frac{(\Omega t)^2}{4} \quad P_b(t/2) = \frac{(\Omega t)^2}{4} \quad (4.55)$$

Si on trouve le système dans l'état b , c'est gagné. Si on le trouve dans l'état a , on projette la fonction d'onde sur l'état a et on repart pour la durée $t/2$ restante, au terme de laquelle la probabilité de trouver b est encore :

$$P_b(t) = \frac{(\Omega t)^2}{4} \quad (4.56)$$

La probabilité totale de trouver le système dans l'état b dans l'une ou l'autre des mesures n'est donc que de $(\Omega t)^2/2$, deux fois plus faible que si on ne fait la mesure qu'à l'instant t . Le lecteur se convaincra aisément que n mesures faites entre 0 et t réduisent la probabilité initiale par un facteur n .

Cet effet Zénon quantique a été observé expérimentalement sur un ion unique piégé par Itano et al². Il s'agit d'un système à trois niveaux a , b , c (figure 4.3). On essaie de faire basculer l'ion de l'état a vers l'état b au moyen d'une radiofréquence résonnante, et on observe simultanément si l'ion est présent ou non sur le niveau a en l'éclairant par un laser résonnant avec la transition $a \leftrightarrow c$.

Remarque : Il existe une manière de comprendre ce résultat expérimental sans faire appel au postulat de réduction du paquet d'onde³. Il faut alors écrire l'évolution du système à trois niveaux sous l'effet des deux champs, radiofréquence et optique. Le champ laser induit un couplage avec l'extérieur, ce qui impose le recours à la matrice densité. Dans ce point de vue, la cohérence ρ_{ab} est affectée par le laser, ce qui en retour modifie l'oscillation entre a et b .

²W. Itano *et al*, Phys. Rev. **A 41**, 2295 (1990).

³Ballentine, Comment Phys. Rev. **A 43**, 5165 (1991); Itano *et al*, Reply to Comment, Phys. Rev. **A 43**, 5168 (1991).

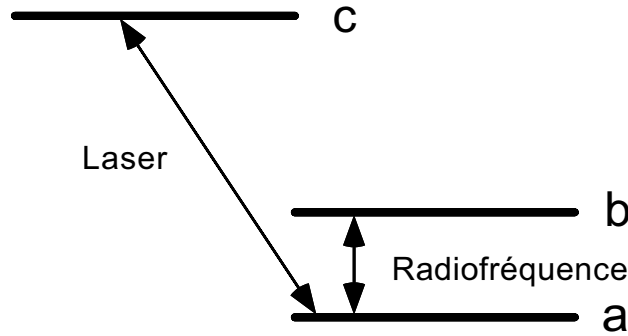


FIG. 4.3 – Schéma de niveaux utilisé pour l'observation de l'effet Zénon quantique.

4.4 Le comportement aux temps longs

L'approximation qui a conduit à la règle d'or de Fermi n'est valable qu'aux temps relativement courts puisque l'on a supposé $|\alpha(t)| \sim 1$ pour résoudre de manière approchée le système différentiel correspondant à l'équation de Schrödinger. Le but de ce paragraphe est d'indiquer comment la loi linéaire $|\alpha(t)|^2 \simeq 1 - \Gamma t$ est modifiée quand le temps t devient de l'ordre de ou supérieur à Γ^{-1} .

Une première voie possible est de persister dans la voie *développement perturbatif*, en allant à un ordre supérieur en V dans la résolution. Cette voie n'est pas très prometteuse. On peut en effet deviner qu'elle reviendra simplement à remplacer la loi linéaire donnée ci-dessus par une loi polynomiale en t . Cette loi sera de toute façon manifestement fautive quand $t \rightarrow +\infty$.

4.4.1 L'approche "équation intégral-différentielle"

Une seconde voie est de chercher à résoudre de manière non perturbative le système différentiel de départ. En intégrant formellement l'équation sur $\tilde{\beta}_f$, on obtient, compte tenu de la condition initiale $\beta_f(0) = 0$:

$$\tilde{\beta}_f(t) = \frac{V_{if}}{i\hbar} \int_0^t \tilde{\alpha}(t') e^{-i\omega_{if}t'} dt' \quad (4.57)$$

On reporte cette valeur dans l'équation d'évolution de $\tilde{\alpha}$ pour obtenir :

$$\dot{\tilde{\alpha}}(t) = - \int_0^t \mathcal{N}(\tau) \tilde{\alpha}(t - \tau) d\tau \quad (4.58)$$

où l'on a posé :

$$\mathcal{N}(\tau) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_f |V_{if}|^2 e^{i\omega_{if}\tau} \quad (4.59)$$

Il n'y a pas en général de solution analytique simple à cette équation intégral-différentielle sur $\tilde{\alpha}$. On peut en chercher une solution approchée en tirant parti du fait que la fonction $\mathcal{N}(\tau)$

est piquée autour de 0; c'est en effet une superposition d'un grand nombre d'exponentielles oscillantes, toutes en phase pour $\tau = 0$, et dont la transformée de Fourier peut s'écrire :

$$\hat{\mathcal{N}}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(\tau) d\tau = \frac{1}{\hbar^2} \sum_f |V_{if}|^2 \delta(\omega - \omega_{if}) \quad (4.60)$$

La largeur en fréquence de cette transformée de Fourier est donc de l'ordre de κ , et la largeur temporelle de $\mathcal{N}(\tau)$ est $\tau_c \sim \kappa^{-1}$.

On peut alors remplacer dans l'équation intégrale-différentielle $\tilde{\alpha}(t - \tau)$ par $\tilde{\alpha}(t)$, en tirant parti du fait que $\tilde{\alpha}$ évolue peu pendant l'intervalle de temps τ_c qui est le seul à contribuer à l'intégrale de (4.58)⁴. On arrive alors à :

$$\dot{\tilde{\alpha}}(t) = - \left(\int_0^t \mathcal{N}(\tau) d\tau \right) \tilde{\alpha}(t) \quad (4.61)$$

équation beaucoup plus simple à analyser et à résoudre que l'équation intégrale-différentielle.

Aux temps t très courts ($t < \tau_c$), l'intégrale varie linéairement avec t , et l'on retrouve le comportement en t^2 discuté au paragraphe précédent pour la variation de $\tilde{\alpha}(t)$. Dès que t dépasse quelques τ_c , l'intégrale atteint une valeur constante, *a priori* complexe, que nous noterons :

$$i\delta\omega_i + \frac{\Gamma}{2} = \int_0^{\infty} \mathcal{N}(\tau) d\tau \quad (4.62)$$

Le sens mathématique à donner à cette intégrale est le suivant : il faut ajouter un facteur de convergence temporelle $e^{-\eta t/\hbar}$ à chaque terme oscillant, calculer l'intégrale, puis faire tendre η vers 0. On a donc :

$$i\delta\omega_i + \Gamma/2 = \frac{1}{\hbar^2} \sum_f |V_{if}|^2 \int_0^{\infty} e^{-i(E_f - E_i + \eta)\tau/\hbar} d\tau = \frac{1}{\hbar} \sum_f \frac{|V_{if}|^2}{i(E_f - E_i) + \eta} \quad (4.63)$$

soit encore :

$$i\delta\omega_i + \frac{\Gamma}{2} = \frac{i}{\hbar} \sum_f \mathcal{P}\mathcal{P} \left(\frac{|V_{if}|^2}{E_i - E_f} \right) + \frac{\pi}{\hbar} \sum_f |V_{if}|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (4.64)$$

Avec cette écriture, on constate que la définition de la partie réelle $\Gamma/2$ coïncide bien avec celle obtenue au premier paragraphe; cette partie réelle va conduire à une décroissance exponentielle de la probabilité de présence dans l'état initial i . La partie imaginaire en $\delta\omega_i$ correspond à un déplacement de la position de l'état discret sous l'effet du couplage au continuum. L'équation d'évolution de $\alpha(t)$ s'écrit en effet :

$$t \gg \tau_c \implies i\hbar\dot{\alpha}(t) = \left(E_i + \hbar\delta\omega_i - i\frac{\hbar\Gamma}{2} \right) \alpha(t) \quad (4.65)$$

ce qui s'intègre en :

$$t \gg \tau_c \implies \alpha(t) = e^{-i(E_i + \hbar\delta\omega_i)t/\hbar} e^{-\Gamma t/2} \implies |\alpha(t)|^2 = e^{-\Gamma t} \quad (4.66)$$

⁴La validité de cette approximation est la même que celle de la règle d'or de Fermi : il faut que l'échelle de temps caractéristique des variations de $\tilde{\alpha}(t)$, à savoir Γ^{-1} , soit grande devant $\tau_c \sim \kappa^{-1}$.

Remarquons que l'expression du déplacement en énergie $\hbar \delta\omega_i$ est identique à la formule bien connue des perturbations stationnaires au deuxième ordre. Dans le cas du couplage d'un système atomique au champ électromagnétique, le déplacement en fréquence $\delta\omega_i$ s'appelle déplacement de Lamb. Son observation expérimentale a constitué un des points de départ de la construction de l'électrodynamique quantique moderne.

Le coefficient $\alpha(t)$ étant déterminé, nous pouvons maintenant trouver très simplement l'expression de $\beta_f(t)$ en intégrant

$$i\hbar\dot{\beta}_f = E_f\beta_f + V_{fi}\alpha$$

Nous trouvons :

$$\beta_f(t) = -\frac{V_{fi}}{\bar{E}_i - E_f + i\hbar\Gamma/2} \left(e^{-iE_f t/\hbar} - e^{-i\bar{E}_i t/\hbar} e^{-\Gamma t/2} \right) \quad (4.67)$$

où l'on a posé $\bar{E}_i = E_i + \hbar\delta\omega_i$. En particulier, pour $t \gg \Gamma^{-1}$, nous pouvons évaluer la probabilité que le système aboutisse dans l'état f :

$$P_f = |\beta_f(\infty)|^2 = \frac{|V_{fi}|^2}{(E_f - \bar{E}_i)^2 + \hbar^2\Gamma^2/4}$$

On trouve donc une loi de probabilité lorentzienne pour la distribution en énergie finale; cette distribution est centrée sur l'énergie perturbée \bar{E}_i et a pour largeur totale à mi-hauteur $\hbar\Gamma$. Rappelons qu'en général chaque probabilité individuelle P_f tend vers 0 quand la taille de la boîte de quantification tend vers l'infini, la quantité physique pertinente étant plutôt la somme des $P_f(t)$ sur un domaine \mathcal{D}_f d'états finals.

4.4.2 L'approche "opérateur résolvante"

Plutôt que travailler avec l'équation de Schrödinger, on peut préférer utiliser l'opérateur résolvante $G(z)$ introduit au chapitre précédent, pour revenir à la fin du calcul au coefficient $\alpha(t)$ donnant l'amplitude de probabilité de trouver la système sur le niveau $|i\rangle$ à l'instant t :

$$\alpha(t) = \langle i|\psi(t)\rangle = \langle i|U(t)|i\rangle \quad (4.68)$$

Il s'agit donc de calculer $\langle i|G(z)|i\rangle$.

Développement diagrammatique

Une première méthode consiste à utiliser le développement infini de $G(z)$ mentionné au chapitre précédent :

$$G = G_0 + G_0VG_0 + G_0VG_0VG_0 + \dots \quad (4.69)$$

Puisque les états i et f sont états propres de H_0 et donc de G_0 , et puisque V fait passer de i à f et de f à i , seuls les termes comportant un nombre pair d'opérateurs V auront une contribution non nulle à $\langle i|G(z)|i\rangle$. Le terme comportant $2n$ opérateurs V s'écrit :

$$c_n(z) = \langle i|G_0(VG_0)^{2n}|i\rangle = \langle i|G_0VG_0VG_0VG_0VG_0\dots VG_0VG_0|i\rangle \quad (4.70)$$

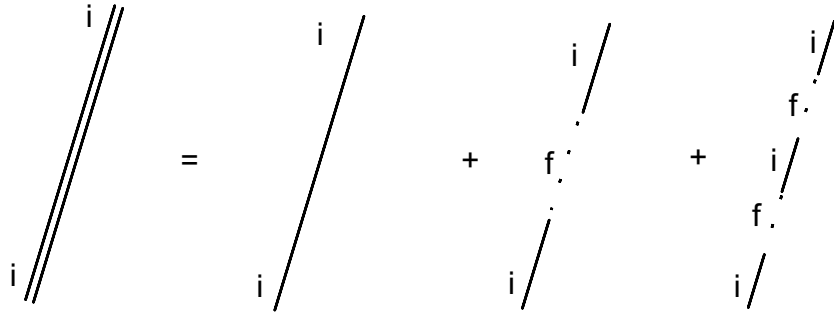


FIG. 4.4 – L'élément de matrice $\langle i|G(z)|i\rangle$ correspond à la somme infinie de diagrammes impliquant un nombre pair d'interactions via le couplage V .

Chaque bloc VG_0V fait passer de i à i , soit :

$$c_n(z) = \frac{1}{(z - E_i)^{n+1}} (\langle i|VG_0V|i\rangle)^n = \frac{1}{(z - E_i)^{n+1}} \left(\sum_f \frac{|V_{fi}|^2}{z - E_f} \right)^n \quad (4.71)$$

La série des c_n se somme donc comme une série géométrique pour donner :

$$\langle i|G(z)|i\rangle = \frac{1}{z - E_i - \sum_f \frac{|V_{fi}|^2}{z - E_f}} \quad (4.72)$$

Ce résultat exact est équivalent à l'équation intégral-différentielle, elle aussi exacte, obtenue au paragraphe précédent. Il correspond à la resommation de tous les processus d'interactions élémentaires décrits par le couplage V (figure 4.4).

Equation implicite

On peut obtenir le même résultat sans faire appel à un développement en série infinie. Il suffit d'utiliser l'expression exacte (implicite) pour $G(z)$:

$$G = G_0 + G_0VG_0 + G_0VG_0VG$$

En prenant l'élément de matrice de cet opérateur entre $\langle i|$ et $|i\rangle$, on trouve immédiatement :

$$\langle i|G(z)|i\rangle = \frac{1}{z - E_i} + \frac{1}{z - E_i} \sum_f \frac{|V_{if}|^2}{z - E_f} \langle i|G(z)|i\rangle \quad (4.73)$$

ce qui conduit au résultat (4.72). Cette méthode est mathématiquement plus simple que celle fondée sur le développement infini de $G(z)$, mais ne montre pas aussi clairement la nature des termes pris en compte dans $G(z)$.

Lien avec l'approche "temporelle"

Pour pousser les calculs plus loin, il s'agit maintenant de faire une approximation sur l'expression de $\langle i|G(z)|i\rangle$. Notons que cette approximation ne correspond pas à sommer un nombre

fini de diagrammes (ceci donnerait le comportement polynomial en temps décrit au début de ce paragraphe); elle consiste à remplacer le résultat de la somme infinie par une valeur approchée, qui continue à prendre en compte l'ensemble des diagrammes possibles.

Pour revenir au point de vue temporel, on sait que l'on aura besoin, pour les temps positifs, de :

$$\langle i|G_+(E)|i\rangle = \frac{1}{E - E_i + i\eta - \sum_f \frac{|V_{fi}|^2}{E - E_f + i\eta}} \quad (4.74)$$

Les valeurs de E pour lesquelles cet élément de matrice prend des valeurs importantes sont situées au voisinage de $E = E_i$, puisque c'est là que la contribution essentielle au dénominateur ($E - E_i + i\eta$) s'annule. Dans le deuxième morceau du dénominateur, qui fait intervenir V , on remplace alors E par cette valeur E_i , en partant du principe que ce deuxième morceau ne contribue de toute façon de manière significative que pour E voisin de E_i :

$$\sum_f \frac{|V_{fi}|^2}{E - E_f + i\eta} \rightarrow \sum_f \frac{|V_{fi}|^2}{E_i - E_f + i\eta} \quad (4.75)$$

On reconnaît alors dans ce terme approché les deux paramètres $\delta\omega_i$ et Γ introduits plus haut :

$$\sum_f \frac{|V_{fi}|^2}{E_i - E_f + i\eta} = \hbar\delta\omega_i - i\frac{\hbar\Gamma}{2} \quad (4.76)$$

L'élément de matrice recherché s'écrit donc :

$$\langle i|G_+(E)|i\rangle \simeq \frac{1}{E - \bar{E}_i + i\frac{\hbar\Gamma}{2}} \quad (4.77)$$

où l'on a introduit l'énergie $\bar{E}_i = E_i + \hbar\delta\omega_i$ de l'état i , "renormalisée" par le couplage de cet état au continuum.

Le retour au point de vue temporel se fait maintenant sans difficulté. $\langle i|G_+(E)|i\rangle$ a un pôle en $\bar{E}_i - i\hbar\Gamma/2$ qui donne après transformation de Fourier⁵ :

$$(t > 0) \quad \alpha(t) = \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iEt/\hbar} \langle i|G_+(E)|i\rangle dE = e^{-i\bar{E}_i t/\hbar} e^{-\Gamma t/2} \quad (4.78)$$

ce qui est identique au résultat obtenu en transformant l'équation intégral-différentielle en équation différentielle. On retrouve en particulier la décroissance exponentielle de la probabilité de présence en $|i\rangle$ avec le taux Γ .

4.4.3 Battements quantiques

La situation envisagée plus haut est la plus simple qui puisse se produire lors du couplage d'un état i avec un continuum. Des situations un peu plus complexes apparaissent lorsque plusieurs états discrets $|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_N\rangle$ sont couplés au même continuum, des phénomènes d'interférence appelés battements quantiques pouvant alors se produire. Il est conseillé sur chaque cas de revenir soit à l'équation intégral-différentielle (on obtient après approximation un système de N équations différentielles couplées), soit à l'approche résolvante (il faut alors évaluer les N^2 éléments de matrice $\langle i_k|G(z)|i_l\rangle$, $k, l = 1 \dots N$) pour déterminer l'évolution du système.

⁵Remarque que l'interaction entre $|i\rangle$ et le continuum a donné au pôle de G_+ une partie imaginaire finie, $i\Gamma/2$, alors que le pôle correspondant de G_{0+} avait une partie imaginaire infiniment petite $i\eta$.

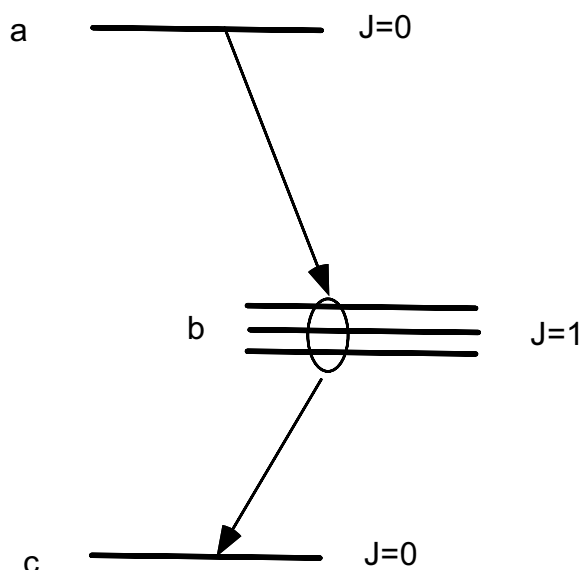


FIG. 4.5 – Cascade atomique faisant apparaître des battements quantiques. L'atome ou le noyau est initialement dans l'état a . La détection d'un photon émis sur la transition $a \rightarrow b$ avec une polarisation ϵ_x prépare le système dans une combinaison linéaire de $|b, m_z = +1\rangle$ et $|b, m_z = -1\rangle$. L'interférence entre les deux possibilités de décroissance $|b, m_z = +1\rangle \rightarrow |c\rangle$ et $|b, m_z = -1\rangle \rightarrow |c\rangle$ conduit à un phénomène de battement.

Donnons sans calculs un exemple d'une telle situation⁶. On considère un système atomique ou nucléaire à trois niveaux a, b, c (figure 4.5). Les niveaux a et c sont de moment cinétique nul, et b est de moment cinétique 1. Le système initialement dans l'état a peut se désexciter en émettant un photon et en tombant sur l'état b . Celui-ci peut à son tour se désexciter et tomber sur l'état c . Supposons que l'on détecte le photon correspondant à la transition $a \rightarrow b$ avec une polarisation ϵ_x . L'état après détection est alors :

$$|b, m_x = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|b, m_z = 1\rangle + |b, m_z = -1\rangle) \quad (4.79)$$

Notons $t = 0$ l'instant de cette première détection et intéressons-nous à la probabilité $P_x(t) dt$ et $P_y(t) dt$ de détecter le photon $b \rightarrow c$ entre t et $t + dt$, avec une polarisation ϵ_x ou ϵ_y . En l'absence de champ magnétique, les trois sous-niveaux de b sont dégénérés et l'on se convainc aisément que l'on retrouve la loi de décroissance habituelle $\exp(-\Gamma_b t)$, le photon émis étant toujours polarisé selon ϵ_x . En revanche, si l'on impose un champ magnétique non nul parallèle à Oz , on constate que P_x et P_y sont modulées à une fréquence égale à la fréquence de Larmor pour le niveau b . A partir du formalisme présenté dans ce chapitre, le lecteur pourra essayer de retrouver ce résultat et de montrer que l'on a toujours $P_x(t) + P_y(t) = \exp(-\Gamma_b t)$.

⁶A. Aspect *et al*, Optics Commun. **49**, 429 (1984)

Troisième partie

Éléments de théorie des collisions

Chapitre 5

Diffusion par un potentiel, approximation de Born

Ce chapitre est consacré à une présentation très succincte du problème de la diffusion d'une particule par un potentiel. Notre but est d'obtenir un résultat très simple et très utile en pratique, la formule de Born, qui détermine les propriétés de diffusion d'un potentiel V , à l'ordre le plus bas non nul en V .

5.1 Diffusion par un potentiel en mécanique classique

Considérons une particule de masse m en mouvement dans un potentiel $V(\mathbf{r})$ (cf. figure 5.1). On suppose que le potentiel tend vers 0 à l'infini, et que la particule est asymptotiquement libre (énergie $E_i = p_i^2/(2m) > 0$). On note z l'axe parallèle à l'impulsion incidente \mathbf{p}_i . Le point O est choisi en un point où le potentiel prend une valeur importante. Pour un potentiel central, comme le potentiel coulombien, O correspond au centre de symétrie du potentiel. La trajectoire incidente de la particule est caractérisée par le paramètre d'impact (b_x, b_y) .

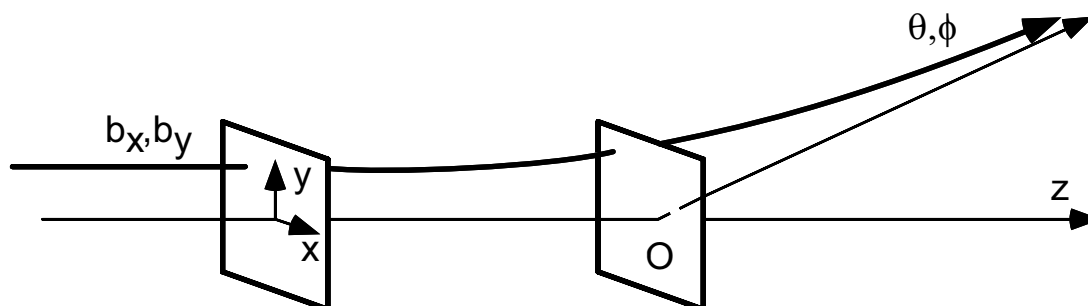


FIG. 5.1 – Diffusion d'une particule de paramètre d'impact b_x, b_y par un potentiel $V(\mathbf{r})$. L'état final est caractérisé par l'angle solide $\Omega = (\theta, \phi)$.

L'intégration de l'équation du mouvement de la particule permet de calculer la direction de diffusion, caractérisée par les deux angles θ, ϕ en coordonnées sphériques d'axe Oz , en fonction

du paramètre d'impact et de l'énergie incidente :

$$\theta = \theta(b_x, b_y, E) \quad \phi = \phi(b_x, b_y, E) \quad .$$

Par exemple, pour la diffusion coulombienne ($V(r) = e^2/r$), on sait que le mouvement est plan (force centrale), ce qui détermine immédiatement ϕ . Par ailleurs, on obtient par un calcul simple :

$$b = \sqrt{b_x^2 + b_y^2} = \frac{e^2}{2E_i} \cot(\theta/2) \quad (5.1)$$

Supposons que l'on envoie un flux Φ_{inc} de particules incidentes sur le centre diffuseur. L'extension transverse du jet de particules est supposée grande devant la portée du potentiel $V(\mathbf{r})$. On définit alors la section efficace différentielle de collision $d\sigma/d\Omega$ par :

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \delta^2\Omega = \frac{\text{Nombre de part. diffusées par unité de temps dans l'angle solide } \delta^2\Omega}{\text{Flux incident}} \quad (5.2)$$

Le numérateur a la dimension d'une fréquence, et le dénominateur a la dimension d'une fréquence par unité de surface. La section efficace différentielle a donc la dimension d'une surface. Plus précisément, $(d\sigma/d\Omega) \delta^2\Omega$ est égal à la surface absorbante qu'il faudrait mettre (en l'absence de $V(\mathbf{r})$) sur le trajet du faisceau incident pour bloquer les particules qui sont diffusées dans l'angle solide $\delta^2\Omega$.

Exemple : Pour la diffusion coulombienne, le nombre de particules diffusées par unité de temps dans $\Omega = (\theta, \phi)$ à $\delta^2\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ près, est égal au nombre de particules de paramètre d'impact $(b_x, b_y) \equiv (b, \phi)$, à $(\delta b, \delta\phi)$ près, b étant relié à θ par (5.1). On a donc :

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \delta^2\Omega = \frac{\Phi_{\text{inc}} b \delta b \delta\phi}{\Phi_{\text{inc}}} \quad \text{avec} \quad |\delta b| = \frac{e^2}{4E_i} \frac{1}{\sin^2(\theta/2)} |\delta\theta| \quad (5.3)$$

soit :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{e^2}{2E_i} \cot(\theta/2)\right) \left(\frac{e^2}{4E_i} \frac{1}{\sin^2(\theta/2)}\right) \frac{1}{\sin\theta} \quad (5.4)$$

ou encore :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{e^2}{4E_i}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} = \left(\frac{me^2}{2p_i \sin^2(\theta/2)}\right)^2 \quad (5.5)$$

5.2 Diffusion quantique et approximation de Born

Quantiquement, le problème se pose de la manière suivante : on prépare une particule incidente avec une impulsion et une énergie initiale aussi bien définies que possible, et on cherche à déterminer la probabilité pour que cette particule soit diffusée dans la direction caractérisée par l'angle solide $\Omega_f \equiv (\theta_f, \phi_f)$. Le but de ce paragraphe est de calculer cette probabilité à l'ordre le plus bas non nul en le potentiel V (approximation de Born).

En toute rigueur, l'impulsion ne peut pas être connue avec une précision infinie, puisque ceci correspondrait à une délocalisation complète en position, ce qui n'est pas compatible avec l'idée intuitive d'une collision. Il faut donc en principe fabriquer un paquet d'onde et regarder comment ce paquet évolue lorsqu'il atteint la zone où le potentiel diffuseur prend des valeurs significatives. C'est ce que nous ferons dans la dernière partie de ce paragraphe. Auparavant nous allons montrer que l'on peut obtenir très simplement un résultat équivalent en raisonnant sur des états "non physiques" que sont les états d'impulsion déterminée $|p_i\rangle$.

5.2.1 Application de la règle d'or de Fermi

Considérons une particule préparée dans un état propre $|\mathbf{p}_i\rangle$ de

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} .$$

Cet état est normalisé dans une boîte cubique de côté L :

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_i \rangle = \frac{e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r} / \hbar}}{\sqrt{L^3}}$$

Sous l'effet du potentiel de couplage \hat{V} , cet état est "instable". Il est couplé à tous les autres états propres $|\mathbf{p}_f\rangle$ de \hat{H}_0 , le potentiel de couplage s'écrivant :

$$V_{fi} = \langle \mathbf{p}_f | \hat{V} | \mathbf{p}_i \rangle = \frac{1}{L^3} \tilde{V}(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f)$$

où l'on a introduit la transformée de Fourier $\tilde{V}(\mathbf{q})$ de $V(\mathbf{r})$:

$$\tilde{V}(\mathbf{q}) = \int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} / \hbar} d^3r$$

On suppose que $V(\mathbf{r})$ décroît suffisamment vite à l'infini pour que cette intégrale converge. La quantité $\tilde{V}(\mathbf{q})$ est donc indépendante de la taille L de la boîte de quantification.

Cherchons à appliquer la règle d'or de Fermi à ce problème. La probabilité d'obtenir au bout d'un temps δt l'état final caractérisé par Ω_f (à $\delta\Omega$ près) est donnée par :

$$\delta^3 P_f = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \rho(E_f = E_i, \Omega_f) \delta^2\Omega \delta t$$

Le nombre de particules aboutissant par unité de temps en Ω_f à $\delta^2\Omega$ près est alors donné par $\delta^3 P_f / \delta t$. Par ailleurs le flux incident, c'est-à-dire la probabilité que la particule dans l'état $|\mathbf{p}_i\rangle$ traverse une surface unité perpendiculaire à \mathbf{p}_i pendant l'unité de temps, est donné par (cf. figure 5.2) :

$$\Phi_i = \frac{v_i}{L^3} = \frac{p_i}{mL^3}$$

On peut alors définir l'équivalent quantique de (5.2) :

$$\frac{d\sigma^{\text{Born}}}{d\Omega} = \frac{\frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \rho(E_f)}{\Phi_i} \quad (5.6)$$

ou encore, en remplaçant la densité d'état par son expression trouvée au chapitre précédent ($\rho(E_f) = m^2 L^3 v_f / (8\pi^3 \hbar^3)$) :

$$\frac{d\sigma^{\text{Born}}}{d\Omega} = \left(\frac{m |\tilde{V}(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f)|}{2\pi \hbar^2} \right)^2 \quad (5.7)$$

Ce résultat est appelé approximation de Born.

On définit également la section efficace totale :

$$\sigma_{\text{tot}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d^2\Omega \quad (5.8)$$

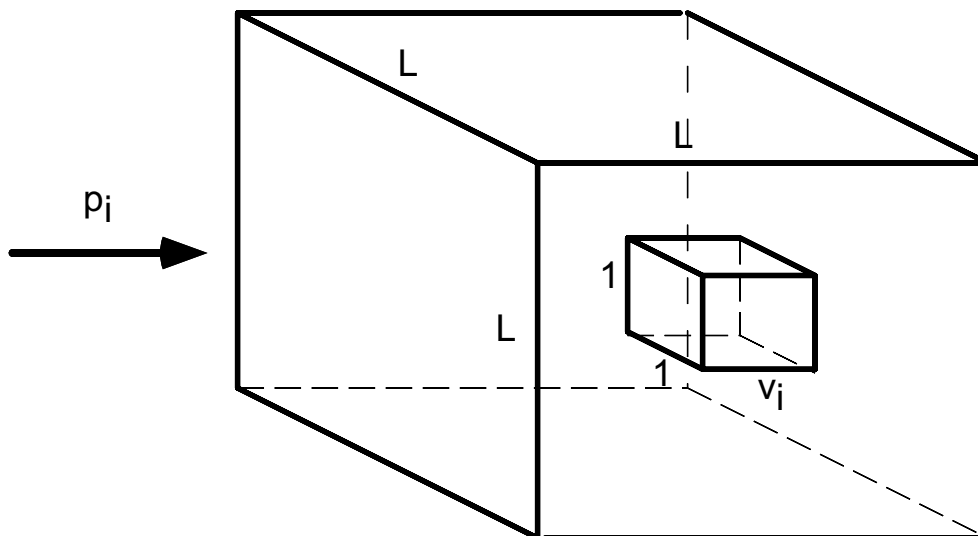


FIG. 5.2 – Calcul du flux associé à une particule quantique préparée dans un état propre de l'impulsion dans une boîte cubique de côté L . Le flux cherché est égal à la probabilité de trouver la particule dans un parallélépipède de longueur v_i (vitesse de la particule) et de section 1×1 (surface unité).

Cette quantité n'a d'intérêt réel qu'en mécanique quantique. Classiquement elle n'existe que si $V(r)$ est strictement nul en dehors d'un volume fini, ce qui exclut par exemple les potentiels variant comme r^{-n} à l'infini (pour s'en convaincre, on peut réécrire σ_{tot} comme $2\pi \int b db$ en utilisant la première partie de (5.3)).

Remarque : à basse énergie, on trouve une section efficace indépendante de l'angle de diffusion. En effet, si p_i est petit devant \hbar/a où a est la portée du potentiel $V(\mathbf{r})$, on peut remplacer $\tilde{V}(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f)$ par $\tilde{V}(0)$ (à condition que cette quantité existe, *i.e.* que $V(\mathbf{r})$ décroisse plus vite que r^{-3} à l'infini). Ce résultat est général et reste valable en dehors de l'approximation de Born.

5.2.2 Exemple

Considérons le potentiel de Yukawa, correspondant à un potentiel coulombien écranté :

$$V(r) = \frac{e^2}{r} e^{-r/a}$$

Ce potentiel s'obtient en superposant une charge ponctuelle positive en O , et une charge négative délocalisée autour de O sur une distance de l'ordre de a .

La transformée de Fourier du potentiel vaut :

$$\tilde{V}(q) = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2 + (\hbar/a)^2}$$

Par ailleurs, $|\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f| = 2p_i \sin(\theta/2)$, soit

$$\frac{d\sigma^{\text{Born}}}{d\Omega} = \left(\frac{2me^2}{4p_i^2 \sin^2(\theta/2) + (\hbar/a)^2} \right)^2$$

Deux régimes d'énergie apparaissent clairement sur ce résultat :

- A basse énergie, c'est-à-dire $p_i \ll \hbar/a$, on obtient comme prévu une section efficace indépendante de l'angle θ (diffusion isotrope) :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2me^2a^2}{\hbar^2} \right)^2$$

A cette énergie, on ne peut donc pas déterminer la structure du potentiel diffuseur.

- A haute énergie, si on ne choisit pas θ trop petit, on peut au contraire négliger la contribution de \hbar/a . On retrouve alors la section efficace Rutherford : la diffusion est essentiellement déterminée par la charge ponctuelle positive localisée en O . La diffusion vers des petits angles ($\theta \sim \hbar/(ap_i)$) permet quant à elle de remonter à la taille a de la distribution négative.

On retrouve sur cet exemple un résultat très général : pour sonder un objet composite, il faut utiliser une onde dont la longueur d'onde est inférieure à la taille de l'objet (ici $h/p_i < a$).

Le fait que l'on retrouve la section efficace Rutherford à la limite d'une portée infinie est intéressant, mais ne doit pas être considéré comme une démonstration rigoureuse. En effet, l'utilisation de l'approximation de Born pour le potentiel Coulombien est très délicate (voir la condition de validité ci-dessous). En fait, comme pour la recherche d'états liés (atome d'hydrogène), le problème Coulombien est exactement soluble pour le problème de diffusion. On peut donc calculer exactement $d\sigma/d\Omega$ et prouver que ce résultat exact coïncide avec le résultat classique (5.5), qui coïncide également comme nous venons de le voir avec le résultat quantique à l'approximation de Born.

5.2.3 Validité de l'approximation de Born

L'approximation de Born revient à calculer la section efficace à l'ordre le plus bas non nul en V , c'est-à-dire l'ordre 2. Le raisonnement que nous avons mené plus haut est en effet fondé sur un traitement perturbatif du potentiel de couplage V . Nous verrons plus loin par quoi remplacer (5.6) quand on veut un résultat valable à un ordre arbitrairement élevé en V .

Pour déterminer la validité de l'approximation de Born, anticipons sur le résultat exact (6.19) que nous établirons bientôt. Ce résultat permet de développer les états propres de H en puissances de V . A l'ordre 0 en V , l'état propre pertinent pour notre problème est simplement l'onde plane incidente :

$$\psi^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{L^3}}$$

avec $\mathbf{p}_i = \hbar\mathbf{k}$. Pour le terme l'ordre 1 en V , on obtient grâce à (6.19) :

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi^{(0)}(\mathbf{r}') d^3r' . \quad (5.9)$$

Notons V_0 la valeur maximale de $V(\mathbf{r})$ et b l'extension de la zone dans laquelle $V(\mathbf{r})$ diffère de 0 de manière significative. Pour des particules lentes, telles que $kb \ll 1$, la valeur de $|\psi^{(1)}(\mathbf{r})|$ est petite devant $|\psi^{(0)}(\mathbf{r})|$ en tout point \mathbf{r} (en particulier en $\mathbf{r} = 0$) si :

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} (4\pi V_0 b^2) \ll 1 \quad \Rightarrow \quad V_0 \ll \frac{\hbar^2}{mb^2} . \quad (5.10)$$

Pour des particules rapides ($kb \gg 1$), cette contrainte peut être affaiblie car le facteur oscillant $e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$ réduit notablement la valeur de l'intégrale (5.9). On trouve dans ce cas¹ le critère de validité :

$$V_0 \ll \frac{\hbar^2}{mb^2} kb \quad \text{si} \quad kb \gg 1. \quad (5.11)$$

Dans l'exemple du potentiel de Yukawa, en prenant $b \sim a$ et $V_0 \sim V(a) \sim e^2/a$, on obtient $a \ll \hbar^2/(me^2)$.

Remarque : la discussion de la validité de l'approximation de Born fait appel à la notion de *portée du potentiel* b . Pour un potentiel de sphère dure, ou pour l'exemple du potentiel de Yukawa, cette notion est immédiate. Elle l'est moins pour des potentiels variant comme C_n/r^n à l'infini. La mécanique quantique donne pourtant dans ce cas une échelle de longueur caractéristique dans ce cas. Pour la déterminer, considérons une particule quantique préparée dans un paquet d'onde centré en \mathbf{r} avec une extension $\Delta r \ll r$. L'inégalité de Heisenberg entraîne $\Delta p \geq \hbar/\Delta r$, et l'énergie cinétique de la particule est donc minorée par :

$$E_c \geq \frac{\Delta p^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2m \Delta r^2} \gg E_c^{\min} = \frac{\hbar^2}{mr^2}.$$

Pour $n > 2$ on voit qu'il existe une distance b au delà de laquelle l'énergie cinétique E_c est toujours très grande devant l'énergie potentielle C_n/r^n :

$$b = (m |C_n|/\hbar^2)^{1/(n-2)},$$

Au delà de b , la particule peut être considérée comme libre, puisque son énergie est essentiellement cinétique. Cette notion n'a évidemment pas de sens en physique classique, ni en mécanique quantique pour $n \leq 2$.

5.2.4 Diffusion inélastique

La formule (5.6) s'applique à de multiples situations, y compris la description de processus inélastiques. Considérons l'exemple de la collision entre une particule de charge q , de masse m et un atome d'hydrogène ; l'hamiltonien \hat{H}_0 s'écrit :

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{H}_{\text{hydr.}}$$

L'état initial est $|\mathbf{p}_i, 1s\rangle$ correspondant à la particule d'impulsion \mathbf{p}_i et l'atome d'hydrogène dans son état fondamental $n = 1, \ell = 0$. On cherche la probabilité de passer vers des états finals $|\mathbf{p}_f; n, \ell\rangle$, correspondant à une conversion d'une partie de l'énergie cinétique de la particule en énergie atomique interne :

$$\frac{p_i^2}{2m} + E_{1,0} = \frac{p_f^2}{2m} + E_{n,\ell}$$

où l'on néglige le recul de l'atome.

Le potentiel de couplage est la somme des interactions coulombiennes entre la particule et le proton d'une part, et la particule et l'électron d'autre part :

$$\hat{V} = \frac{qq_p}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}_p|} + \frac{qq_e}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}_p|}.$$

¹Voir par exemple les ouvrages de mécanique quantique de A. Messiah ou de L. Landau et E. Lifshitz.

On peut alors utiliser la formule de Born (5.6) pour trouver la section efficace de ce processus. Attention : le flux incident fait intervenir l'impulsion initiale p_i , alors que la densité finale fait intervenir l'impulsion finale p_f . Pour un processus élastique, ces deux quantités sont égales et s'éliminent dans le calcul conduisant à (5.7), mais ce n'est plus le cas pour un processus inélastique.

5.3 Diffusion d'un paquet d'ondes

L'utilisation de la règle d'or de Fermi pour un état non physique comme une onde plane peut laisser planer un doute sur la validité du résultat (5.6). Nous nous proposons dans ce paragraphe de retrouver cette formule en étudiant l'évolution d'un paquet d'ondes. Le raisonnement est plus lourd que celui proposé plus haut, mais il est utile de l'avoir mené jusqu'au bout au moins une fois.

Nous considérons donc un état initial $|i\rangle$ bien localisé le long de l'axe z et complètement délocalisé dans le plan transverse xy . Cet état est formé en superposant un grand nombre d'états $|\mathbf{p}\rangle$, avec $\mathbf{p} = (0, 0, p)$:

$$|\Psi(0)\rangle = |i\rangle = \sum_p c(p) |\mathbf{p}\rangle$$

La normalisation de cet état entraîne :

$$1 = \sum_p |c(p)|^2 = \frac{L}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} |c(p)|^2 dp \quad (5.12)$$

On peut par exemple considérer un paquet gaussien :

$$c(p) = \left(\frac{\hbar}{L \delta p}\right)^{1/2} (2\pi)^{1/4} \exp\left(-\frac{(p-p_i)^2}{4\delta p^2} - i\frac{pz_i}{\hbar}\right)$$

correspondant à un paquet centré au point z_i .

Puisque ce paquet est bien localisé en z , son extension δz vérifie

$$\delta z \ll L$$

Par ailleurs, le principe de Heisenberg impose $\delta z \geq \hbar/(2\delta p)$, soit

$$\delta p \gg \frac{\hbar}{L}$$

On retrouve bien qu'il faut superposer un grand nombre d'états $|\mathbf{p}\rangle$ pour former ce paquet.

Pour avoir une bonne définition de l'impulsion initiale, nous imposons $\delta p \ll p_i$, où $p_i = mv_i$ est l'impulsion moyenne du paquet d'onde. On va laisser ce paquet d'onde évoluer un temps T suffisant ($v_i T > |z_i|$) pour que le paquet arrive au voisinage du point O et soit diffusé. En revanche T devra être suffisamment court pour que la particule n'ait pas le temps de parcourir plusieurs fois la boîte de quantification, et d'interagir plusieurs fois avec $V(\mathbf{r})$. On prend donc :

$$\delta z \ll v_i T \ll L$$

On en déduit $T \gg \hbar/\delta E$, où $\delta E = p_i \delta p_i / m$. Le temps d'évolution est donc long devant l'inverse de la largeur en énergie du paquet d'onde. Ceci autorisera l'identification de la distribution $\delta^{(T)}(E)$ trouvée au chapitre précédent avec la distribution de Dirac $\delta(E)$.

Les états finals $|f\rangle$ auxquels nous nous intéressons sont caractérisés par la direction de l'impulsion finale et son module :

$$|f\rangle = |\Omega_f, p_f\rangle \quad \Omega_f = (\theta_f, \phi_f)$$

On s'intéresse à la probabilité de trouver l'impulsion finale dans un domaine d'angle solide $\delta\Omega$ autour de Ω_f , indépendamment² du module de p_f . On cherche donc à calculer

$$\delta^2 P_f = \sum_{f \in \mathcal{D}_f} |\langle f | \Psi(T) \rangle|^2$$

En introduisant l'opérateur d'évolution $U(T)$ de 0 à T , cette probabilité se réécrit :

$$\delta^2 P_f = \sum_{f \in \mathcal{D}_f} \left| \sum_p c(p) \langle f | U(T) | \mathbf{p} \rangle \right|^2 \quad (5.13)$$

L'élément de matrice $\langle f | U(T) | \mathbf{p} \rangle$ a été évalué au chapitre précédent, à l'ordre 1 en V (coefficient $\beta_f(T)$) :

$$\langle f | U(t, t_i) | \mathbf{p} \rangle = \frac{V_{fp}}{i\hbar} \int_{t_i}^t e^{-iE_f(t-t')/\hbar} e^{-iE_p t'/\hbar} dt' \quad (5.14)$$

ce qui donne :

$$\left| \sum_p c(p) \langle f | U(T) | \mathbf{p} \rangle \right|^2 = \left| \int_{t_i}^t dt' e^{iE_f t'/\hbar} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}/\hbar} V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t') \right|^2$$

où l'on a utilisé :

$$\Psi(\mathbf{r}, t') = \sum_p c(p) e^{-iE_p t'/\hbar} | \mathbf{p} \rangle$$

La fonction $\Psi(\mathbf{r}, t')$ représente l'état du paquet d'onde à l'instant t' en l'absence de potentiel diffuseur.

Deux cas limites peuvent alors être distingués :

- Si t est trop proche de t_i , le paquet d'onde n'a pas le temps d'arriver au voisinage de O . L'intégrale sur \mathbf{r} est alors toujours quasi nulle, car le recouvrement de $V(\mathbf{r})$ et de $\Psi(\mathbf{r}, t')$ est négligeable pour tous les temps t' entre t_i et t .
- Si on attend assez longtemps, *i.e.* t assez grand, alors il y aura une gamme d'instant $\Delta t'$ entre t_i et t pour lesquels le recouvrement de $V(\mathbf{r})$ et de $\Psi(\mathbf{r}, t')$ sera significatif, c'est-à-dire des temps t' pour lesquels la particule est au voisinage de O . Pour les temps t' antérieurs ou postérieurs à cet intervalle $\Delta t'$, la contribution de l'intégrale sur \mathbf{r} sera au contraire négligeable.

²Le processus considéré ici est élastique. La distribution en énergie finale, si on l'analysait, reflèterait la distribution en énergie du paquet d'ondes initial.

Pourvu que t soit assez grand, on peut alors étendre les bornes t_i, t de l'intégrale sur le temps respectivement à $-\infty$ et $+\infty$, seul l'intervalle $\Delta t'$ contribuant de manière significative. En utilisant :

$$\delta(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iEt/\hbar} dt$$

on peut alors écrire :

$$\delta^2 P_f = 4\pi^2 \sum_{f \in \mathcal{D}_f} |V_{fi}|^2 \left| \sum_p c(p) \delta(E_f - E_p) \right|^2$$

où l'on a supposé que l'élément de matrice $|V_{fp}|$ ne variait quasiment pas sur l'intervalle δp . Utilisons maintenant la relation générale :

$$\sum_p c(p) \delta(E_f - E_p) = \frac{L}{2\pi\hbar} \int c(p) \delta\left(\frac{p_f^2}{2m} - \frac{p^2}{2m}\right) dp = \frac{L}{2\pi\hbar v_f} c(p_f)$$

Nous trouvons alors :

$$\begin{aligned} \delta^2 P_f &= \sum_{f \in \mathcal{D}_f} \frac{L^2}{\hbar^2 v_f^2} |c(p_f)|^2 |V_{fi}|^2 \\ &= \int_{\mathcal{D}_f} \frac{L^2}{\hbar^2 v_f^2} |c(p_f)|^2 |V_{fi}|^2 \rho(E_f) dE_f d^2\Omega \end{aligned}$$

En remplaçant dE_f par $v_f dp_f$, en utilisant le fait que $c(p)$ est piquée autour de p_i , et en insérant (5.12), on trouve :

$$\delta^2 P_f = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{L}{v_i} \rho(E_f = E_i) |V_{fi}|^2 \delta^2\Omega$$

Pour définir une section efficace, il faut se ramener à un flux unité, alors que nous avons supposé jusqu'ici que la particule était délocalisée dans le plan xy , donc sur une surface L^2 . Nous avons donc finalement :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = L^2 \delta^2 P_f = \frac{\frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \rho(E_f)}{\Phi_i} \quad (5.15)$$

qui coïncide avec le résultat (5.6).

Chapitre 6

Théorie formelle des collisions

Pour décrire quantiquement une collision, ou une diffusion créée par un potentiel V , on considère un paquet d'onde $|\chi_i\rangle$, d'impulsion moyenne p_i et de dispersion $\Delta p \ll p_i$, que l'on envoie sur un centre diffuseur. Ce paquet d'onde est formé en superposant des états propres d'un hamiltonien H_0 , de manière à fabriquer un état asymptotiquement libre et normalisable. On se donne de même un état final possible $|\chi_f\rangle$, et on peut ainsi calculer l'amplitude de probabilité pour passer de $|\chi_i\rangle$ à $|\chi_f\rangle$: $\langle \chi_f | U(T/2, -T/2) | \chi_i \rangle$. L'intervalle de temps T d'interaction a été choisi centré sur $t = 0$ pour simplifier au maximum les expressions suivantes.

Considérons pour fixer les idées le cas d'une particule ponctuelle de masse m non relativiste. Le paquet d'onde initial a une définition en énergie

$$\Delta E = \frac{p_i \Delta p}{m} \geq \frac{p_i \hbar}{2m \Delta x} \quad , \quad (6.1)$$

où Δx est l'étendue spatiale du paquet d'onde incident. Il est initialement centré au point $x_i = -p_i T / (2m)$, avec

$$|x_i| \gg \Delta x \quad (6.2)$$

pour que l'interaction avec le potentiel $V(\mathbf{r})$, localisé autour de $\mathbf{r} = 0$, n'ait pas encore commencé de manière appréciable au temps initial $-T/2$. Le centre du paquet d'onde arrive donc au voisinage de 0 en $t = 0$. On choisit une taille L de la boîte de quantification grande devant $p_i T / m$ pour éviter tout effet "d'interaction multiple" lié à des réflexions de la particule dans la boîte de quantification. Les deux inégalités (6.1) et (6.2) entraînent une contrainte sur E et T :

$$\Delta E \gg \frac{\hbar}{T} \quad (6.3)$$

Pour définir une quantité indépendante de la largeur initiale du paquet d'onde, on va chercher à prendre la limite de l'amplitude de probabilité définie plus haut lorsque l'énergie ΔE tend vers 0, le temps T tendant alors vers l'infini du fait de (6.3). Les états $|\chi_i\rangle$ et $|\chi_f\rangle$ tendent alors vers des états propres $|i\rangle$ et $|f\rangle$ de H_0 , qui sont les ondes planes $e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r} / \hbar}$ et $e^{i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r} / \hbar}$ dans le cas particulier de la diffusion d'une particule ponctuelle sans spin. Le problème abordé dans ce chapitre est donc de donner un sens à :

$$(?) \quad \langle f | U(+\infty, -\infty) | i \rangle = \lim_{\substack{\Delta E \rightarrow 0 \\ T \rightarrow \infty}} \langle \chi_f | U(T/2, -T/2) | \chi_i \rangle \quad (?)$$

6.1 Les états stationnaires de diffusion

Pour définir correctement la limite précédente, nous allons procéder en deux étapes.

6.1.1 Le point de vue interaction

En l'absence de tout potentiel diffuseur, l'amplitude de probabilité considérée ci-dessus oscille du fait de l'hamiltonien H_0 :

$$\langle \chi_f | U(T/2, -T/2) | \chi_i \rangle = \langle \chi_f | e^{-iH_0 T/\hbar} | \chi_i \rangle = \sum_{E, \xi} \langle \chi_f | E, \xi \rangle \langle E, \xi | \chi_i \rangle e^{-iET/\hbar}$$

où $|E, \xi\rangle$ représente un état propre générique de H_0 , d'énergie E . Cette oscillation n'a rien de compliqué, mais elle est clairement une gêne pour effectuer le passage à la limite quand T tend vers l'infini.

On définit pour cela l'opérateur d'évolution en point de vue interaction ce qui revient à "soustraire" l'évolution libre. On pose :

$$U_I(t_f, t_i) = U_0(0, t_f) U(t_f, t_i) U_0(t_i, 0)$$

et on va s'intéresser à la limite de la quantité $\langle \chi_f | U_I(T/2, -T/2) | \chi_i \rangle$ quand T tend vers l'infini :

$$(?) \quad \langle f | U_I(+\infty, -\infty) | i \rangle = \lim_{\substack{\Delta E \rightarrow 0 \\ T \rightarrow \infty}} \langle \chi_f | U_I(T/2, -T/2) | \chi_i \rangle \quad (?)$$

Une fois cette limite prise, il ne sera pas difficile de revenir aux éléments de matrice de U .

6.1.2 La limite de Gell-Mann – Goldberger

Comme nous l'avons fait dans le cadre de l'approximation de Born, il est possible de pousser le calcul jusqu'au bout avec des paquets d'onde pour aboutir à l'élément de matrice recherché. Les calculs sont malheureusement relativement lourds. Aussi prendrons nous ici une autre approche fondée sur un passage à la limite différent dans la forme, mais équivalent sur le fond.

Soit $f(t)$ une fonction bornée quand $t \rightarrow \pm\infty$. On pose

$$f(+\infty) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\eta}{\hbar} \int_0^{+\infty} f(t) e^{-\eta t/\hbar} dt \quad (6.4)$$

$$f(-\infty) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\eta}{\hbar} \int_{-\infty}^0 f(t) e^{\eta t/\hbar} dt \quad (6.5)$$

Il est clair que si $f(t)$ a effectivement une limite f_0 en $\pm\infty$, on retrouve cette limite avec la définition de Gell-Mann – Goldberger. De plus, si $f(t)$ a un comportement à l'infini du type $f_0 + f_1 \sin(\omega t + \phi)$, on trouve là aussi la limite f_0 au sens de Gell-Mann – Goldberger.

6.1.3 États stationnaires de diffusion

Un état propre $|i\rangle$ de H_0 étant donné, on pose :

$$|\psi_i^+\rangle \equiv U_I(0, -\infty) |i\rangle \equiv \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\eta}{\hbar} \int_{-\infty}^0 U_I(0, t) |i\rangle e^{\eta t/\hbar} dt \quad (6.6)$$

De même pour un autre état propre $|f\rangle$ de H_0 , on pose :

$$\langle \psi_f^- | \equiv \langle f | U_I(\infty, 0) \equiv \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\eta}{\hbar} \int_0^{+\infty} \langle f | U_I(t, 0) e^{-\eta t/\hbar} dt \quad (6.7)$$

Les états $|\psi_i^+\rangle$ et $|\psi_f^-\rangle$ sont appelés *états stationnaires de diffusion*, l'état $|\psi_i^+\rangle$ étant qualifié d'*avancé* et l'état $|\psi_f^-\rangle$ de *retardé*.

6.1.4 Interprétation physique

Quand on définit ainsi $U_I(0, -\infty)$ et $U_I(+\infty, 0)$, on simule grâce au coefficient $e^{\pm\eta t/\hbar}$ un branchement et un débranchement très lent du potentiel de couplage V , la constante de temps étant \hbar/η (cf. figure 6.1). Ceci est mathématiquement équivalent à considérer un paquet d'onde de longueur $\Delta x = v_i T = v_i \hbar/\eta$, interagissant donc de manière efficace avec V pendant un temps \hbar/η .

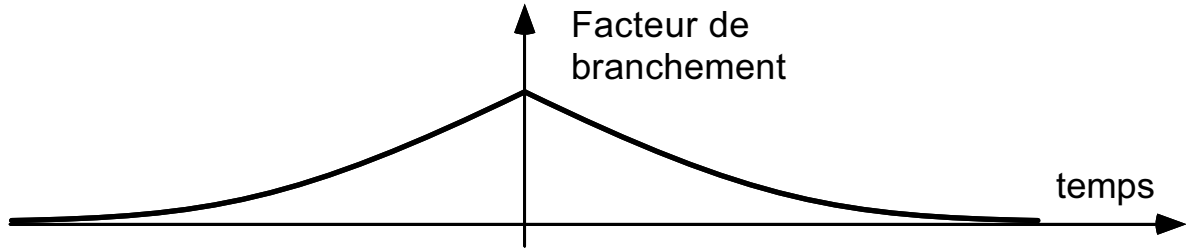


FIG. 6.1 – Branchement et débranchement du potentiel diffusant en un temps \hbar/η .

Cette interprétation physique indique clairement l'ordre dans lequel les limites doivent être prises. La longueur du paquet d'onde doit tendre vers l'infini (η tend vers 0) tout en restant petit devant la taille de la boîte de quantification. Il faut donc considérer toutes les limites sur η comme :

$$\eta \rightarrow 0^+, \quad L \rightarrow \infty, \quad L \gg v_i \frac{\hbar}{\eta}$$

Si on ne respecte pas cette dernière inégalité, on peut arriver à des résultats incohérents.

6.1.5 Lien avec l'opérateur résolvante

Les états stationnaires de diffusion ont une expression très simple en fonction des opérateurs $G_{\pm}(E)$ introduits précédemment. Considérons par exemple $|\psi_i^+\rangle$. En utilisant

$$U_I(0, t) = U(0, t) U_0(t, 0) = U(0, t) U_0^\dagger(0, t)$$

avec $U(0, t) = \exp(iHt/\hbar)$, on trouve :

$$|\psi_i^+\rangle = \frac{\eta}{\hbar} \int_{-\infty}^0 e^{-i(E_i - H + i\eta)t/\hbar} |i\rangle dt$$

où E_i est l'énergie de $|i\rangle$ pour l'hamiltonien H_0 . La limite $\eta \rightarrow 0^+$ est implicite à partir de maintenant. En intégrant formellement cette équation, on trouve :

$$|\psi_i^+\rangle = \frac{i\eta}{E_i - H + i\eta} |i\rangle = \left(1 + \frac{1}{E_i - H + i\eta}(H - H_0)\right) |i\rangle$$

ou encore

$$|\psi_i^+\rangle = (1 + G_+(E_i) V) |i\rangle \quad (6.8)$$

De même on montre que

$$|\psi_i^-\rangle = (1 + G_-(E_i) V) |i\rangle \quad (6.9)$$

L'élément de matrice à calculer pour caractériser le processus de diffusion est alors

$$\langle f|U_I(+\infty, -\infty)|i\rangle = \langle \psi_f^- | \psi_i^+ \rangle \quad (6.10)$$

Il est bien clair à ce stade que cette expression est purement formelle, aucune condition n'ayant encore été mise concernant la convergence de la limite $\eta \rightarrow 0^+$. Quand cette limite existe, on définit ainsi l'élément de matrice de la matrice S : $S_{fi} = \langle \psi_f^- | \psi_i^+ \rangle$.

6.2 Propriétés des états stationnaires de diffusion

Pour pouvoir déterminer si les expressions manipulées ci-dessus ont effectivement une limite, il va falloir faire une hypothèse sur la nature du couplage V . Les propriétés suivantes des états stationnaires de diffusion vont nous le permettre :

1. Si $|k\rangle$ est état propre de H_0 avec la valeur propre E_k , alors $|\psi_k^\pm\rangle$ est état propre de H avec la même valeur propre, pourvu "que V se comporte bien à l'infini".
2. Les états $|\psi_k^\pm\rangle$ sont solution de l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$|\psi_k^\pm\rangle = |k\rangle + G_{0\pm}(E_k) V |\psi_k^\pm\rangle \quad (6.11)$$

Il s'agit d'une équation implicite sur $|\psi_k^\pm\rangle$, qui ne fait intervenir que G_0 , au contraire de la définition (6.8,6.9) qui est explicite mais qui fait intervenir G .

3. L'ensemble des $|\psi_k^+\rangle$ (resp. $|\psi_k^-\rangle$) est orthonormé. Ils forment généralement une base (continue) de l'espace de Hilbert pourvu qu'on leur adjoigne les éventuels états liés de $H_0 + V$.

Démonstrations

1. On trouve directement :

$$H|\psi_k^+\rangle = H|k\rangle + HG_+V|k\rangle = E_k|k\rangle + (1 + HG_+)V|k\rangle$$

Comme $1 + HG_+ = (E_k + i\eta)G_+$, on en déduit

$$\begin{aligned} H|\psi_k^+\rangle &= E_k(1 + G_+V)|k\rangle + i\eta G_+V|k\rangle \\ &= E_k|\psi_k^+\rangle + i\eta G_+V|k\rangle \end{aligned} \quad (6.12)$$

Jusqu'ici aucune approximation n'a été faite et aucun passage à la limite n'a été mené. Quand on fait tendre η vers 0, que reste-t-il du dernier terme ?

En règle générale, un terme en $i\eta G_+|k\rangle$ ou $i\eta G_{0+}|k\rangle$ ne tend pas vers 0. Par exemple :

$$\langle k'|i\eta G_{0+}|k\rangle = \frac{i\eta}{E_k - E_{k'} + i\eta} \langle k'|k\rangle = \begin{cases} 1 & \text{si } k = k' \\ 0 & \text{si } k \neq k' \end{cases}$$

Néanmoins la présence de V peut rendre ce terme négligeable. Prenons l'exemple d'une particule ponctuelle dans un potentiel $V(\mathbf{r})$, et calculons un élément de matrice de $i\eta G_{0+}V$ (plutôt que $i\eta G_+V$, qui serait trop compliqué à évaluer explicitement) :

$$\langle \mathbf{p}'|i\eta G_{0+}V|\mathbf{p}\rangle = \frac{i\eta}{E_p - E_{p'} + i\eta} \frac{1}{L^3} \int V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3r$$

Si la transformée de Fourier de V existe en $\mathbf{q} = 0$, cet élément de matrice tend bien vers 0 quand on prend la limite $\eta \rightarrow 0$, $L \rightarrow \infty$. Nous considérerons dans la suite un couplage V tel que ηG_+V est nul dans la limite $\eta \rightarrow 0$. Le résultat (6.12) devient donc :

$$H|\psi_k^+\rangle = E_k|\psi_k^+\rangle \quad . \quad (6.13)$$

C'est ce que l'on cherchait à démontrer.

2. Utilisons la relation $G = G_0 + G_0VG$ sur l'équation définissant $|\psi_k^+\rangle$:

$$|\psi_k^+\rangle = (1 + G_{0+}V + G_{0+}VG_{0+}V)|k\rangle = |k\rangle + G_{0+}V \underbrace{(1 + G_+V)|k\rangle}_{|\psi_k^+\rangle}$$

d'où le résultat.

3. Calculons le produit scalaire de deux états avancés :

$$\langle \psi_j^+|\psi_k^+\rangle = \{(1 + G_+(E_j)V)|j\rangle\}^\dagger |\psi_k\rangle = \langle j|\psi_k\rangle + \langle j|VG_-(E_j)|\psi_k^+\rangle$$

Injectons maintenant l'équation de Lippmann-Schwinger dans le premier terme, et utilisons dans le second terme le fait que $|\psi_k^+\rangle$ est état propre de H :

$$\langle \psi_j^+|\psi_k^+\rangle = \langle j|k\rangle + \langle j|G_{0+}(E_k)V|\psi_k^+\rangle + \langle j|V \frac{1}{E_j - E_k - i\eta} |\psi_k^+\rangle$$

En utilisant finalement le fait que $|j\rangle$ est état propre de H_0 dans le second terme, on trouve que le deuxième et troisième termes se compensent pour ne laisser que :

$$\langle \psi_j^+|\psi_k^+\rangle = \delta_{j,k} \quad .$$

On montrerait de même :

$$\langle \psi_j^-|\psi_k^-\rangle = \delta_{j,k} \quad .$$

6.3 Matrice T et matrice S

Revenons maintenant à la quantité que nous souhaitons calculer pour évaluer un processus de diffusion :

$$S_{fi} = \langle f | U_I(+\infty, -\infty) | i \rangle = \langle \psi_f^- | \psi_i^+ \rangle \quad (6.14)$$

En utilisant ce qui précède, cet élément de matrice de l'opérateur S se transforme en :

$$\begin{aligned} S_{fi} &= \{ (1 + G_-(E_f)V) | f \rangle \}^\dagger | \psi_i^+ \rangle \\ &= \langle f | \psi_i^+ \rangle + \langle f | V G_+(E_f) | \psi_i^+ \rangle \end{aligned}$$

Utilisons l'équation de Lippmann – Schwinger, et le fait que $|\psi_i^+\rangle$ est état propre de H :

$$\begin{aligned} S_{fi} &= \langle f | \{ | i \rangle + G_{0+}(E_i)V | \psi_i^+ \rangle \} + \frac{1}{E_f - E_i + i\eta} \langle f | V | \psi_i^+ \rangle \\ &= \delta_{f,i} - \frac{2i\eta}{(E_i - E_f)^2 + \eta^2} \langle f | V | \psi_i^+ \rangle \end{aligned}$$

Quand on prend la limite $\eta \rightarrow 0_+$, la fonction $\eta / ((E_i - E_f)^2 + \eta^2)$ tend vers $\pi \delta(E_f - E_i)$.

On arrive ainsi au résultat essentiel :

$$S_{fi} = \delta_{f,i} - 2i\pi \delta(E_f - E_i) \langle f | T(E_i) | i \rangle \quad (6.15)$$

où l'on a introduit la matrice $T(E_i)$:

$$T(E_i) = V + V \frac{1}{E_i - H + i\eta} V \quad (6.16)$$

ou encore

$$T_{fi}(E_i) = \langle f | T(E_i) | i \rangle = \langle f | V | \psi_i^+ \rangle \quad (6.17)$$

Ceci permet de donner en particulier l'expression exacte (mais difficile à calculer explicitement bien sûr) de la section efficace différentielle. Le raisonnement mené pour arriver à la formule de Born peut être repris point par point, la “seule” modification consistant à remplacer dans l'expression (5.6), obtenue à l'approximation de Born, V par $T(E_i)$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\frac{2\pi}{\hbar} |T_{fi}(E_i)|^2 \rho(E_f = E_i)}{\Phi_i} \quad (6.18)$$

Compte-tenu de la forme de (6.16), il est bien clair que l'on retrouve l'approximation de Born si on se limite à l'ordre la plus bas en V .

On retrouve cette modification consistant à remplacer V par $T(E_i)$ en comparant les résultats (4.14) et (6.15). Pour (4.14), on avait supposé implicitement que $f \neq i$, si bien que le terme $\delta_{i,f}$ n'y figure pas. En revanche, on n'avait pas encore introduit la représentation interaction, si bien que le dépendance temporelle due aux énergies propres de H_0 ($e^{-i(E_i+E_f)T/\hbar}$) est encore présente. Mis à part ces deux différences, la structure des deux résultats est identique au changement $V \rightarrow T(E)$ près.

6.4 Diffusion d'une particule non relativiste par un potentiel

Considérons maintenant le problème spécifique d'une particule de masse m , d'hamiltonien non perturbé $H_0 = p^2/(2m)$ diffusée par un potentiel $V(\mathbf{r})$, localisé au voisinage de $\mathbf{r} = 0$. Les états $|i\rangle$ et $|f\rangle$ sont les ondes planes $e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar}/\sqrt{L^3}$ et $e^{i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}/\hbar}/\sqrt{L^3}$. Compte tenu des résultats obtenus au paragraphe précédent, on sait désormais que le problème se ramène à la détermination de l'état stationnaire de diffusion $\psi_i^+(\mathbf{r})$ associé à $e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar}$, les éléments de matrice de T s'en déduisant ensuite grâce à (6.17).

Il est bien clair que la résolution de ce problème permet également de traiter le choc entre deux particules de masse m_1 et m_2 interagissant par un potentiel $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$:

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

L'introduction du centre de masse et de la variable relative donne en effet :

$$H = \frac{P_G^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})$$

où l'on a posé :

$$\mathbf{P}_G = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \quad \mathbf{R}_G = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M} \quad \mathbf{p} = \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{M} \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

avec $M = m_1 + m_2$ et $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$. Le mouvement du centre de masse est très simple (mouvement rectiligne uniforme) et le mouvement de la variable relative correspond à la diffusion d'une particule de masse μ par le potentiel $V(\mathbf{r})$.

6.4.1 Diffusion à une dimension

Le problème de la diffusion à une dimension est en fait un des premiers que l'on est amené à résoudre en mécanique quantique, bien avant de connaître l'approximation de Born. Considérons par exemple un creux de potentiel comme celui indiqué sur la figure 6.2. A une dimension, la notion de section efficace se réduit à la notion de probabilité de réflexion et de transmission, fonctions de l'énergie incidente E_i .

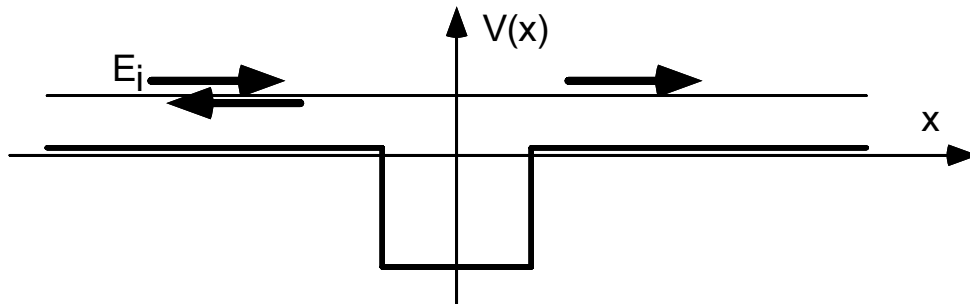


FIG. 6.2 – La diffusion à une dimension : quelle est la probabilité d'avoir une réflexion sur un creux de potentiel ?

Pour calculer ces probabilités, la procédure est bien connue de tout étudiant débutant en mécanique quantique. On cherche les états propres de l'hamiltonien total $H = H_0 + V$, que l'on sait déterminer explicitement pour un potentiel en créneau. Parmi ces états propres, on choisit l'état d'énergie $E_i = \hbar^2 k^2 / (2m)$ ($k > 0$) qui varie asymptotiquement en $\pm\infty$ comme :

$$x \rightarrow -\infty : \psi(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx} \quad x \rightarrow +\infty : \psi(x) = t e^{ikx}$$

d'où l'on déduit les coefficients de réflexion et de transmission $R = |r|^2$ et $T = |t|^2$. On pourra se convaincre sans difficulté que l'état que l'on construit ainsi n'est autre que l'état stationnaire de diffusion $\psi_i^+(x)$ associé à $e^{ik_i x}$.

On voit ainsi sur cet exemple très simple comment on peut déduire les propriétés "collisionnelles" d'un potentiel V à partir des propriétés asymptotiques d'un état stationnaire de diffusion. Ce résultat est bien sûr implicite dans les formules (6.16-6.17).

6.4.2 Etats stationnaires de diffusion à 3 dimensions

L'utilité des états stationnaires de diffusion à trois dimensions réside dans les propriétés suivantes :

1. L'état $|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle$ associé à un état propre $|i\rangle = |\mathbf{k}\rangle$ de H_0 est solution de l'équation intégrale de la diffusion :

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{L^3}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{i\mathbf{k}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}') d^3r' \quad \dots \quad (6.19)$$

2. Le comportement asymptotique de l'état $|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle$ s'écrit :

$$\sqrt{L^3} \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(k, \mathbf{n}, \mathbf{n}') \frac{e^{ikr}}{r} \quad . \quad (6.20)$$

où \mathbf{n} et \mathbf{n}' sont les vecteurs unitaires définis par $\mathbf{k} = k\mathbf{n}$ et $\mathbf{n}' = \mathbf{r}/r$ (voir figure 6.3). La quantité $f(k, \mathbf{n}, \mathbf{n}')$, qui a la dimension d'une longueur, est appelée *amplitude de diffusion*.

3. La section efficace différentielle s'écrit :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, \mathbf{n}, \mathbf{n}')|^2 \quad (6.21)$$

Démonstrations :

1. Utilisons l'équation de Lippmann – Schwinger, multipliée à gauche par $\langle \mathbf{r} |$:

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{L^3}} + \int \langle \mathbf{r} | G_{0+}(E_k) | \mathbf{r}' \rangle V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}') d^3r' \quad . \quad (6.22)$$

La quantité $\langle \mathbf{r} | G_{0+}(E_k) | \mathbf{r}' \rangle$ se calcule assez facilement. En introduisant une relation de fermeture :

$$\sum_{\mathbf{k}'} |\mathbf{k}'\rangle \langle \mathbf{k}'| = \frac{L^3}{8\pi^3} \int |\mathbf{k}'\rangle \langle \mathbf{k}'| d^3k'$$

on trouve :

$$\langle \mathbf{r} | G_{0+}(E_k) | \mathbf{r}' \rangle = \frac{1}{8\pi^3} \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\boldsymbol{\rho}}}{k^2 - k'^2 + i\eta'} d^3k'$$

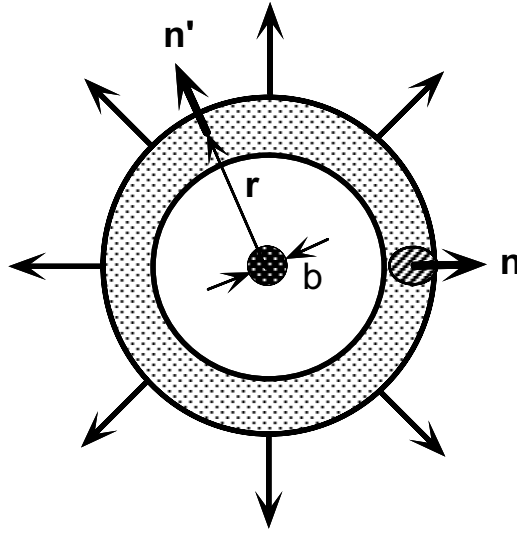


FIG. 6.3 – Diffusion d'un paquet d'onde se propageant dans la direction \mathbf{n} par un potentiel $V(\mathbf{r})$ de portée b .

avec $\eta' = (2m/\hbar^2)\eta$ et $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. L'intégration angulaire ne pose pas de difficulté :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | G_{0+}(E_k) | \mathbf{r}' \rangle &= -i \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2 \rho} \int_0^{+\infty} \frac{k' (e^{ik'\rho} - e^{-ik'\rho})}{k^2 - k'^2 + i\eta'} dk' \\ &= -i \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2 \rho} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k' e^{ik'\rho}}{k^2 - k'^2 + i\eta'} dk' \end{aligned}$$

Cette dernière intégrale se calcule par la méthode des résidus. Le contour d'intégration est fermé par le haut du plan complexe (puisque $\rho > 0$) et le pôle qui contribue est $k' = k + i\eta''$, où η'' est positif et infiniment petit. On trouve alors :

$$\langle \mathbf{r} | G_{0+}(E_k) | \mathbf{r}' \rangle = -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

Il suffit de reporter ce résultat dans (6.22) pour démontrer la première propriété.

2. Pour démontrer la deuxième propriété, prenons un point \mathbf{r} très loin de O . Dans l'intégrale (6.22), les points \mathbf{r}' sont localisés au voisinage de l'origine (à b près, où b est la portée du potentiel). On peut donc utiliser le développement :

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 = r^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' + r'^2 \Rightarrow |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \sim r \left(1 - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} \right) = r - \mathbf{n}' \cdot \mathbf{r}'$$

dans l'argument de l'exponentielle de $\langle \mathbf{r} | G_{0+}(E_k) | \mathbf{r}' \rangle$. En ce qui concerne le dénominateur, on remplace simplement $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ par r puisque les termes suivants du développement auraient une contribution négligeable au flux diffusé (termes en r^{-2}, r^{-3}, \dots). On obtient alors le résultat (6.20) avec :

$$f(k, \mathbf{n}, \mathbf{n}') = -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \sqrt{L^3} \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (6.23)$$

où l'on a posé $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}'$. Il s'agit d'une équation implicite, reliant le comportement asymptotique de l'état stationnaire de diffusion à sa valeur dans la région où le potentiel $V(\mathbf{r}')$ prend des valeurs significatives.

3. Nous avons vu que le calcul non perturbatif des amplitudes de diffusion revenait à remplacer les éléments de matrice $\langle f|V|i\rangle$ du potentiel V intervenant dans l'approximation de Born, par les éléments de matrice de T :

$$\langle f|V|i\rangle \longrightarrow \langle f|T|i\rangle = \langle f|V|\psi_i^+\rangle$$

ou encore, en représentation \mathbf{r} :

$$\int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} d^3r' \longrightarrow \int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \sqrt{L^3} \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}') d^3r' \quad (6.24)$$

On reconnaît l'intégrale intervenant dans la définition de $f(k, \mathbf{n}, \mathbf{n}')$. En revenant au résultat de Born pour la section efficace :

$$\frac{d\sigma^{\text{Born}}}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} d^3r' \right)^2$$

et en faisant la substitution (6.24), on arrive au résultat indiqué.

Pour évaluer une section efficace dans un processus de diffusion à trois dimensions, le principe est donc clair. Il faut chercher un état propre de l'hamiltonien $H = H_0 + V$ avec la condition aux limites (6.20), et la quantité recherchée est simplement le coefficient de l'onde sphérique divergente e^{ikr}/r .

Notons que l'invariance par renversement du temps de l'hamiltonien entraîne :

$$f(k, \mathbf{n}, \mathbf{n}') = f(k, -\mathbf{n}', -\mathbf{n}) \quad , \quad (6.25)$$

6.4.3 La limite basse énergie

A basse énergie, la diffusion devient isotrope, au moins si le potentiel décroît assez vite à l'infini (plus vite que r^{-3}). L'échelle d'énergie au dessous de laquelle se produit cette simplification est directement reliée à la portée b du potentiel. Quand $kb \ll 1$ (ou de manière équivalente $E \ll \hbar^2 k^2 / (2m)$), l'amplitude de diffusion est indépendante de \mathbf{n} et \mathbf{n}' .

Ce résultat important pour la physique des gaz et des liquides à basse température se déduit de (6.23). Les seuls \mathbf{r}' qui contribuent à l'intégrale sont tels que $|\mathbf{r}'| \leq b$. Par conséquent $|\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'| \leq kb \ll 1$, et on peut remplacer $e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}$ par 1. L'amplitude de diffusion est donc indépendante de la direction diffusée \mathbf{n}' . En utilisant (6.25), on en déduit que $f(k, \mathbf{n}, \mathbf{n}')$ est également indépendant de la direction incidente \mathbf{n} .

En résumé, à basse énergie $E \ll \hbar^2 / (2mb^2)$, l'onde diffusée est sphérique :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(k) \frac{e^{ikr}}{r} \quad .$$

La section efficace totale est alors très simple à calculer :

$$\sigma_{\text{tot}} = 4\pi |f(k)|^2$$

Quand k tend vers 0, on peut montrer que $f(k)$ tend vers une limite finie, réelle et en général non nulle. On pose :

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} f(k)$$

Cette quantité a , qui peut être positive ou négative, est appelée *longueur de diffusion*. Elle joue un rôle essentiel pour la description du champ moyen créé par une assemblée de particules “froides” sur une particule test. Ainsi, l'indice de réfraction pour un neutron d'impulsion p par un milieu matériel avec une densité de noyaux ρ s'écrit :

$$n = 1 - 2\pi a \frac{\rho}{k^2}$$

où a est la longueur de diffusion associée au potentiel d'interaction neutron-noyaux. Comme en optique, ce résultat s'obtient en sommant les ondes sphériques $a e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}/|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|$ diffusées par les noyaux du matériau. La longueur de diffusion et son signe sont également essentiels pour la description des condensats de Bose-Einstein et leur stabilité.

6.4.4 Le cas d'un potentiel central

Il n'est pas simple de résoudre (analytiquement ou numériquement) le problème aux valeurs propres de $H_0 + V(\mathbf{r})$. En revanche, quand le potentiel est central ($V(\mathbf{r}) = V(r)$), ceci devient nettement plus aisé. On peut en effet chercher les états propres communs de H , L^2 et L_z :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \phi) \frac{u_{k,l,m}(r)}{r} \quad , \quad (6.26)$$

où les $Y_l^m(\theta, \phi)$ sont les harmoniques sphériques :

$$L^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \quad L_z Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \phi)$$

Prenons l'axe z parallèle à l'onde incidente. Cette onde est alors état propre de L_z avec la valeur propre 0 et on obtient par une algèbre standard :

$$e^{ikz} \sim \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \left((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr} \right) \quad , \quad kr \gg 1 \quad (6.27)$$

où les $P_l(\cos \theta)$ sont les polynômes de Legendre. Une onde plane peut donc être vue comme la superposition d'ondes sphériques entrantes $P_l(\cos \theta) e^{-ikr}/r$ et d'ondes sphériques sortantes $P_l(\cos \theta) e^{ikr}/r$, avec une phase relative de 0 ou π selon la parité de l .

L'état de diffusion est asymptotiquement la somme de l'onde incidente et de l'onde sortante $f(k, \theta) e^{ikr}/r$. Il peut donc être mis sous la forme :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \left((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{2i\delta_l} e^{ikr} \right) \quad \text{pour } |\mathbf{r}| \gg b \quad , \quad (6.28)$$

où les coefficients $e^{2i\delta_l}$ sont de module 1, ou, de manière équivalente, les coefficients δ_l sont réels. En effet, du fait de la symétrie sphérique, il y a conservation du flux pour chaque onde partielle.

La solution du problème de diffusion se ramène alors à la détermination des déphasages $\delta_l(k)$. On reporte (6.26) dans l'équation aux valeurs propres pour obtenir une équation de Schrödinger 1D pour chaque onde partielle $u_{k,l}(r)$ (on oublie l'indice $m = 0$). En supposant que $u_{k,l}(r)/r$ est régulier en $r = 0$, cette équation s'écrit :

$$u_{k,l}''(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2mV(r)}{\hbar^2} \right) u_{k,l}(r) = 0 \quad . \quad (6.29)$$

Utilisant (6.28), nous choisissons la forme asymptotique suivante pour sa solution :

$$u_{k,l}(r) \propto (-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{2i\delta_l} e^{ikr} \quad \text{pour } r \gg b \quad . \quad (6.30)$$

L'amplitude de diffusion $f(k, \theta)$ and la section efficace de collision $\sigma(k)$ sont données par :

$$f(k, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(e^{2i\delta_l} - 1 \right) P_l(\cos \theta)$$

et :

$$\sigma(k) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(k) \quad \text{avec} \quad \sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k)$$

Un tel problème uni-dimensionnel peut être résolu numériquement avec relativement peu d'efforts, si une solution analytique n'est pas disponible ¹.

On notera que la prise en compte de l'indiscernabilité se fait de manière très simple dans ce contexte. En appliquant les principes dégagés dans la première partie de ce cours, on trouve que :

- Pour des bosons sans spin ou polarisés, il faut doubler la contribution des ondes partielles de l pair, et annuler la contribution des ondes de l impair.
- Pour des fermions, il faut au contraire annuler la contribution des ondes paires et doubler la contribution des ondes impaires. A très basse température, puisque seule l'onde s ($l = 0$) contribue (diffusion isotrope), on en déduit que des fermions polarisés ne subissent quasiment plus de collisions.

6.4.5 Le théorème optique

L'opérateur d'évolution est unitaire. Par passage à la limite, S est également unitaire : $SS^\dagger = 1$. Cette unitarité entraîne :

$$\sigma_{\text{totale}} = \frac{4\pi}{k_i} \mathcal{I}m f(k, \mathbf{n}, \mathbf{n}) \quad (6.31)$$

Démonstration :

$$\begin{aligned} \delta_{i,j} &= \langle i | SS^\dagger | j \rangle = \sum_k S_{ik} S_{kj}^\dagger \\ &= \sum_k (\delta_{i,k} - 2i\pi \delta(E_i - E_k) T_{ik}) (\delta_{j,k} + 2i\pi \delta(E_k - E_j) T_{jk}^*) \\ &= \delta_{i,j} - 2i\pi \delta(E_i - E_j) (T_{ij} - T_{ji}^*) + 4\pi^2 \delta_k \delta(E_i - E_k) \delta(E_k - E_j) T_{ik} T_{jk}^* \end{aligned}$$

On factorise $\delta(E_i - E_j)$ et on choisit $E_i = E_j$. On trouve alors :

$$i(T_{ij} - T_{ji}^*) = 2\pi \sum_k \delta(E_i - E_k) T_{ik} T_{jk}^*$$

¹Pour en savoir plus, en particulier sur le comportement des coefficients $\delta_l(k)$ à basse énergie, on pourra consulter par exemple L. Landau et E. Lifschitz, *Mécanique quantique*, chapitre XVII, Editions Mir.

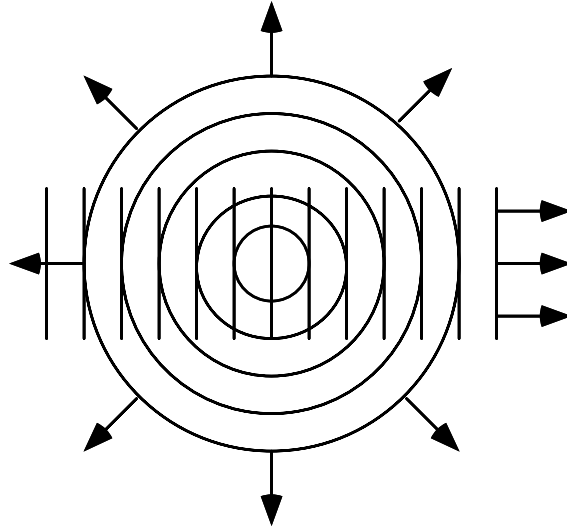


FIG. 6.4 – Interférence entre l'onde incidente et l'onde diffusée vers l'avant.

Prenons en particulier $i = j$. Le terme de gauche donne :

$$i(T_{ii} - T_{ii}^*) = -2 \operatorname{Im} T_{ii} = \frac{4\pi\hbar^2}{mL^3} \operatorname{Im} (f(k, \mathbf{n}, \mathbf{n}))$$

Le terme de droite donne quant à lui :

$$2\pi \sum_k \delta(E_i - E_k) T_{ik} T_{jk}^* = \hbar\Phi_i \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d^2\Omega = \frac{\hbar^2 k_i}{mL^3} \sigma_{\text{tot}}$$

d'où le résultat. Ce théorème optique exprime une simple conservation des probabilités². Si on envoie une onde $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, la présence de l'onde sphérique divergente en e^{ikr}/r implique que l'onde incidente soit atténuée. Mathématiquement cette atténuation résulte de l'interférence destructive vers l'avant entre $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ et e^{ikr}/r (cf. figure 6.4) .

6.5 Diffusion résonnante

Le but de ce dernier paragraphe est de montrer le résultat suivant : lorsque, dans un processus de diffusion, il y a passage par un état intermédiaire relativement stable (état discret), il y a résonance de la section efficace en tant que fonction de l'énergie incidente. La largeur de la résonance ΔE est reliée à la durée de vie τ de l'état intermédiaire par $\Delta E = \hbar/\tau$.

Pour montrer simplement ce résultat, reprenons le modèle développé lors de l'étude du couplage d'un état discret à un continuum. On suppose que l'état initial du système est un état $|c\rangle$ du continuum. Le processus de diffusion est induit par un couplage V dont les éléments de matrice ont par hypothèse la propriété suivante :

$$V_{cc'} = 0 \quad V_{dd} = 0 \quad V_{cd} = V_{dc}^* \neq 0$$

²...ce qui est logique puisqu'on le déduit de l'unitarité de l'opérateur d'évolution.

où d est l'état discret, et c' un autre état quelconque du continuum.

Pour évaluer la section efficace correspondant à la diffusion de l'état $|i\rangle \equiv |c\rangle$ vers un autre état du continuum $|f\rangle \equiv |c'\rangle$, on doit calculer l'élément de la matrice T entre ces deux états :

$$\langle c'|T|c\rangle = \langle c'|V|c\rangle + \langle c'|V \frac{1}{E_c - H + i\eta} V|c\rangle$$

Le premier terme est nul par hypothèse. Le second donne :

$$\langle c'|T|c\rangle = V_{c'd} \langle d| \frac{1}{E_c - H + i\eta} |d\rangle V_{dc}$$

L'élément de matrice de $1/(E_c - H + i\eta)$ entre $\langle d|$ et $|d\rangle$ a déjà été calculé (de manière approchée). Il vaut :

$$\langle d| \frac{1}{E_c - H + i\eta} |d\rangle = \frac{1}{E_c - E_d + i\hbar\Gamma/2}$$

où $\Gamma = 1/\tau$ est l'inverse de la durée de vie du niveau discret d du fait de son couplage au continuum. Si on reporte ce résultat dans l'expression de la section efficace, on arrive alors à :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto |\langle c'|T|c\rangle|^2 \propto \frac{1}{(E_c - E_d)^2 + \hbar^2\Gamma^2/4}$$

Comme annoncé, la section efficace présente une variation résonnante autour du point $E_c = E_d$.

Exemple

Un exemple de résonance est fournie par la diffusion d'un photon par un atome. Les état du continuum correspondent à l'atome dans son état fondamental f en présence d'un photon de vecteur d'onde \mathbf{k} et de polarisation ϵ : $|c\rangle = |f; \mathbf{k}, \epsilon\rangle$. L'état discret correspond à l'atome dans un état excité e en l'absence de photon : $|d\rangle = |e; 0\rangle$.

Plaçons-nous à l'approximation dipolaire électrique, et rappelons la valeur de la densité d'états $\rho(E) = L^3 E^2 / (8\pi^3 \hbar^3 c^3)$ et du flux associé à une photon $\Phi = c/L^3$. On trouve alors que la section efficace de diffusion d'un photon de fréquence ω et de polarisation $\vec{\epsilon}_i$ en un photon de polarisation $\vec{\epsilon}_f$ vaut :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(\mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_i)^2 (\mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_f)^2}{16 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 c^4} \frac{\omega^4}{(\omega - \omega_A)^2 + \Gamma^2/4}$$

où ω_A est la pulsation de résonance de l'atome. Discutons les conséquences de ce résultat dans deux domaines de fréquence :

- Pour $\omega \ll \omega_A$, utilisons $d \sim qa_0$ et $\omega_A \sim \hbar/(ma_0^2)$, où a_0 est le rayon de Bohr et m la masse de l'électron. On arrive alors à :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim r_0^2 \left(\frac{\omega}{\omega_A} \right)^4$$

où $r_0 = e^2/(mc^2)$ est le *rayon classique de l'électron*. Une des conséquences les plus spectaculaires de cette variation rapide de la section efficace avec la fréquence du photon est la couleur bleue du ciel. Ce domaine d'énergie est appelé domaine de la diffusion Rayleigh.

- Pour $\omega = \omega_A$, on trouve en utilisant la valeur de Γ trouvée en (4.48) que la section efficace totale est de l'ordre de λ^2 . Cette très grande valeur (bien supérieure au carré de la taille d'un atome) correspond à une surtension de 10^{12} !

Notons enfin que dans le domaine $\omega \gg \omega_A$ (domaine de la diffusion Thomson), la formule donnée ci-dessus ne s'applique plus car l'approximation dipolaire électrique n'est plus valable. Il faut alors utiliser la forme en $-\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ du couplage atome-rayonnement plutôt que la forme en $-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$.