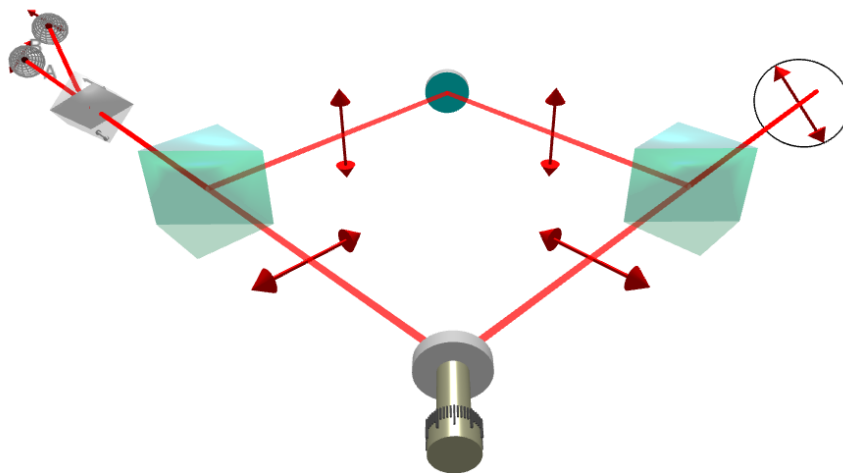




Physique Quantique

PHY3X061

Manuel Joffre

Département de Physique de l'Ecole polytechnique
et
Laboratoire d'Optique et Biosciences
Ecole polytechnique, CNRS, INSERM, Institut Polytechnique de Paris
Palaiseau

5 mars 2026

Quelques valeurs numériques

Grandeur physique	Symbole	Valeur
Constante de Planck	h	6.626×10^{-34} J·s
Constante de Planck réduite	$\hbar$	1.055×10^{-34} J·s
Vitesse de la lumière	c	2.998×10^8 m/s
Constante de Boltzmann	k_B	1.381×10^{-23} J/K
Charge élémentaire	q	1.602×10^{-19} C
Masse de l'électron	m_e	9.11×10^{-31} kg
Masse du proton	m_p	1.673×10^{-27} kg
Masse du neutron	m_n	1.675×10^{-27} kg
Rapport gyromagnétique de l'électron	γ_e	$-2.0023 \frac{ q }{2m_e} \quad \frac{\gamma_e}{2\pi} \approx -28.0$ GHz/T
Rapport gyromagnétique du proton	γ_p	$5.59 \frac{ q }{2m_p} \quad \frac{\gamma_p}{2\pi} \approx 42.6$ MHz/T
Rapport gyromagnétique du neutron	γ_n	$-3.83 \frac{ q }{2m_n} \quad \frac{\gamma_n}{2\pi} \approx -29.1$ MHz/T
Constante de structure fine	$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$	1/137
Energie d'ionisation de l'hydrogène	E_I	13.6 eV
Rayon de Bohr	a_1	0.053 nm

L'image de couverture représente un interféromètre en polarisation permettant la génération d'un état de polarisation arbitraire et faisant l'objet de la simulation www.quantum-physics.polytechnique.fr/interpolar.php.

Table des matières

Avant-Propos	9
1 Dualité onde-corpuscule	11
1.1 Eléments de mécanique classique et de physique ondulatoire	11
1.1.1 Mécanique classique	11
1.1.2 Physique ondulatoire	12
1.2 Des quanta de Planck aux ondes de de Broglie	16
1.3 Interférences avec un seul photon	19
2 Polarisation d'un photon unique	23
2.1 Polarisation de la lumière en optique classique	23
2.1.1 Polarisation linéaire, circulaire et elliptique	23
2.1.2 Polariseurs à une et deux voies	25
2.1.3 Interférométrie en polarisation	27
2.1.4 Lame à retard	28
2.2 Polarisation de la lumière en optique quantique	29
2.2.1 Mesure de polarisation en optique quantique	29
2.2.2 Interférométrie en polarisation	30
2.2.3 Description de l'état de polarisation d'un photon unique	30
2.3 Mesure de l'état de polarisation d'un photon unique	34
2.3.1 Cas d'une mesure de polarisation linéaire	34
2.3.2 Cas d'une base de mesure arbitraire	34
2.3.3 Paramètres requis pour décrire l'état de polarisation d'un photon	36
2.4 Evolution de l'état de polarisation d'un photon unique	37
2.4.1 Evolution temporelle	37
2.4.2 Evolution spatiale	37
3 Principes fondamentaux	41
3.1 Espace des états	41
3.2 Opérateurs linéaires agissant dans un espace de Hilbert	44
3.2.1 Définition	44
3.2.2 Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur linéaire	46
3.2.3 Adjoint d'un opérateur	47
3.2.4 Opérateurs hermitiens	47

3.2.5	Fonction d'un opérateur	48
3.3	Mesure	49
3.3.1	Mesure de l'état du système	49
3.3.2	Mesure d'une grandeur physique dans le cas non dégénéré	50
3.3.3	Mesure d'une grandeur physique dans le cas dégénéré	51
3.3.4	Valeur moyenne d'une grandeur physique	54
3.4	Evolution temporelle	55
3.4.1	Opérateur d'évolution	55
3.4.2	Hamiltonien	56
3.4.3	Equation de Schrödinger	58
3.4.4	Propriétés de l'opérateur d'évolution	60
3.5	Commutation des observables	61
3.5.1	Deux observables qui commutent	61
3.5.2	Ensemble Complet d'Observables qui Commutent	63
3.5.3	Deux observables qui ne commutent pas	63
3.5.4	Théorème d'Ehrenfest	63
4	Mécanique quantique	65
4.1	Position	65
4.1.1	Cas discret	65
4.1.2	Notion de fonction d'onde	66
4.1.3	Densité de probabilité de présence	67
4.1.4	Produit scalaire hermitien dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$	68
4.1.5	Spectre continu et fonction de Dirac	69
4.2	Impulsion	70
4.2.1	Fonctions propres de l'observable impulsion	70
4.2.2	Opérateurs dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ associés aux observables position et impulsion	71
4.2.3	Nature hermitienne des opérateurs position et impulsion	72
4.2.4	Transformation de Fourier	73
4.2.5	Calcul du commutateur $[\hat{x}, \hat{p}_x]$	74
4.3	Energie	74
4.3.1	Hamiltonien	74
4.3.2	Equation de Schrödinger pour une particule ponctuelle	75
4.3.3	Fonctions propres de l'Hamiltonien	75
4.3.4	Cas d'une particule libre	76
4.3.5	Puits infini	77
4.4	Mouvement d'une particule ponctuelle à trois dimensions	79
5	Transformation de Fourier	83
5.1	Transformée de Fourier et transformée de Fourier inverse	83
5.1.1	Définition	83
5.1.2	Propriétés	85

5.2	Inégalité de Heisenberg	88
5.2.1	Inégalité de Cauchy Schwartz	88
5.2.2	Inégalité de Heisenberg généralisée	89
5.2.3	Inégalité de Heisenberg pour la position et l'impulsion	91
5.3	Mouvement d'une particule libre	93
5.3.1	Résolution de l'équation de Schrödinger	93
5.3.2	Déplacement d'un paquet d'ondes	95
5.3.3	Étalement d'un paquet d'ondes	96
5.4	Mouvement d'une particule dans un potentiel $V(x)$	97
5.5	Expérience des franges d'Young	99
5.6	Mouvement d'une particule dans un espace à trois dimensions	101
6	Systèmes à une dimension spatiale	103
6.1	Propriétés générales des états propres de l'Hamiltonien	103
6.1.1	Equation aux valeurs propres	103
6.1.2	Base propre constituée de fonctions réelles	104
6.1.3	Potentiel invariant par parité	104
6.1.4	Potentiel nul	105
6.1.5	Potentiel constant par morceaux	106
6.2	Etats liés et états de diffusion dans un puits de potentiel	107
6.2.1	Traitement classique	107
6.2.2	Etats liés	108
6.2.3	Cas d'un puits symétrique	109
6.2.4	Etats de diffusion	110
6.3	Puits semi-infini	110
6.3.1	Propriétés générales	110
6.3.2	Modélisation par un potentiel constant par morceaux	111
6.4	Effet tunnel	114
6.4.1	Barrière tunnel	114
6.4.2	Microscopie à effet tunnel	115
6.4.3	Radioactivité alpha	116
6.4.4	Effet tunnel dans un double puits	118
6.5	Oscillateur harmonique	121
6.5.1	Oscillateur harmonique en mécanique classique	121
6.5.2	Hamiltonien de l'oscillateur harmonique	122
6.5.3	Diagonalisation de $\hat{N}$ à l'aide de la méthode de Dirac	124
6.5.4	Détermination des fonctions propres	125
6.5.5	Opérateurs position et impulsion	127
7	Intrication quantique	129
7.1	Produit tensoriel	130
7.2	Paires de photons intriqués	133

7.2.1	Génération de paires de photons intriqués	133
7.2.2	Corrélation des mesures	134
7.2.3	Invariance par rotation	137
7.2.4	Intrication et décohérence	138
7.3	Violation de l'inégalité de Bell	139
7.3.1	Théories à variables cachées	139
7.3.2	Théorème de Bell	139
7.3.3	Le verdict de l'expérience	140
8	Le spin 1/2	143
8.1	Éléments de magnétostatique	143
8.1.1	Moment magnétique	143
8.1.2	Modèle classique du magnétisme atomique	144
8.1.3	Précession de Larmor	145
8.2	L'expérience de Stern et Gerlach	147
8.3	Construction des observables $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ et $\hat{S}_z$	149
8.4	Mesure du spin selon un axe arbitraire	152
8.5	Description complète de l'état d'une particule de spin 1/2	155
9	Résonance magnétique nucléaire	159
9.1	Quelques compléments sur le spin 1/2	159
9.1.1	Sphère de Bloch	159
9.1.2	Rotation d'un spin 1/2	161
9.1.3	Précession de Larmor	162
9.2	Résonance magnétique nucléaire	164
9.2.1	Dispositif expérimental	164
9.2.2	Précession de Larmor autour d'un champ dépendant du temps	165
9.2.3	Résolution directe de l'équation de Schrödinger	168
9.3	Applications	171
A	Rappels mathématiques	173
A.1	Conservation de la norme	173
A.2	Calcul de quelques intégrales utiles	175
A.2.1	Intégrale d'une fonction gaussienne	175
A.2.2	Intégrale de la fonction sinus cardinal	176
A.3	Distribution (ou fonction) de Dirac	176
A.4	Transformée de Fourier d'une gaussienne	180
B	Quelques démonstrations techniques	183
B.1	Ondes électromagnétiques dans le vide	183
B.2	Equation de Helmholtz en régime paraxiale	184
B.3	Etalement d'un paquet d'ondes libre	187
B.4	Clivage des niveaux d'énergie dans un puits double	188

B.5 Démonstration de l'inégalité de Bell	191
B.6 Optimisation du paramètre de Bell	191
Bibliographie	195
Index	199

Avant-Propos

Ce cours de physique quantique s'appuie sur la longue tradition de l'enseignement de la physique à l'Ecole polytechnique, et tout particulièrement sur les cours magistraux de mécanique quantique dispensés successivement par Jean-Louis Basdevant, Jean Dalibard [1] puis Philippe Grangier. Je tiens à les remercier chaleureusement pour les nombreux conseils qu'ils m'ont prodigués depuis que j'enseigne à l'Ecole polytechnique et pour m'avoir fait partager leur vision enthousiasmante de l'enseignement de la physique. Je remercie également toutes les enseignantes et enseignants avec lesquels j'ai eu le privilège de collaborer pendant ces dernières décennies. Sans pouvoir tous les citer, je tiens à remercier plus particulièrement celles et ceux ayant plus récemment participé à cet enseignement de tronc commun, à savoir Carlota Andres, Thomas Ayrat, Jacqueline Bloch, Antoine Bourget, Landry Bretheau, Guillaume Bossard, Antoine Browaeys, Fabian Cadiz, Sébastien Corde, Igor Ferrier-Barbut, Jean-Baptiste Fouvry, Denis Grebenkov, Joël Griesmar, Jongwook Kim, Mathias Kobyenko, Clément Livache, Danijela Marković, Nicolas Olivier, Jean-Damien Pillet, Marc-Olivier Renou, Gabriel Rigon, Roberto Salerno, Grégory Schehr, Sylvain Schwartz, Pierfrancesco Urbani, Vincent Vennin et Filippo Vicentini. Leurs nombreuses remarques sur les cours magistraux que j'ai dispensés ces dernières années ont grandement contribué à la production de ce document.

À partir de la promotion X2025, la structure de cet enseignement a été profondément remaniée. Au lieu de prendre comme point de départ la mécanique ondulatoire, nous partirons ici d'un système à deux états [2, 3] ce qui nous permettra de nous familiariser au plus vite avec le formalisme de Dirac, avant de passer dans un second temps à la mécanique quantique au sens propre du terme, qui requiert la manipulation d'espaces de Hilbert de dimension infinie. Je tiens à remercier Jacqueline Bloch, Antoine Browaeys et Fabian Cadiz pour leurs suggestions très pertinentes lors de nos discussions ayant mené à la conception de cette nouvelle structure, ainsi que Nicolas Olivier et Martin Plazenet pour avoir lu attentivement une première version de ce nouveau document et pour leurs judicieuses remarques qui ont contribué à son amélioration. Je remercie en outre Axel Aubisse et Axel Amestoy (X24) pour m'avoir signalé des erreurs figurant dans une version antérieure de ce texte.

Ce cours s'appuie en outre sur plusieurs démonstrations expérimentales. Je remercie en particulier les nombreux élèves ayant réussi à reproduire deux expériences emblématiques de la physique quantique. La première expérience, portant sur la construction des franges d'Young photon par photon [4, 5, 6], a été développée par trois groupes de PSC co-encadrés avec Daniel Suchet : Elia Azar, Philippine Burdeau, Axel Lévy, Pablo Richard, Arnaud Sarfati (X2017), Gabriel Billiet, Matthieu Boulanger, Cyril Miras, Louis Pagot, Xuan-Du Trinh (X2018), et Auriane Huyghues-Despointes, Pauline Garelli, Jacques de Garidel Thoron, Jean-Baptiste Moussa, Joseph Roux de Bézieux (X2019). La seconde expérience, portant sur la violation de l'inégalité de Bell [7, 8], a été

développée par deux groupes de PSC co-encadrés avec Sylvain Schwartz : Ghada Ben Slama, Victor Chabirand, Corentin Guimard, Léo Kam Kon Seng, Antoine Rodrigues (X2021), et Mohamed Ait El Berkaoui, Sofia Billault, Jonas Bloch, Vincent Harff, Issame Maghraoui, Cédric Voreiter (X2022). Je remercie enfin Sébastien Corde et Philippe Grangier pour l'expérience sur le pouvoir rotatoire et Alain Louis-Joseph pour l'expérience sur la Résonance Magnétique Nucléaire.

Après un premier chapitre portant sur la dualité onde-corpuscule, nous introduirons au chapitre 2 les postulats de la physique quantique dans le cas particulier de l'état de polarisation d'un photon unique. Une généralisation de ces postulats permettra d'introduire au chapitre 3 le formalisme de Dirac dans le cas général. Ce n'est qu'à partir du chapitre 4 que nous considérerons, à l'aide de ce formalisme de Dirac, le problème de mécanique associé au mouvement d'une particule ponctuelle, qui sera approfondi aux chapitre 5 et 6, portant respectivement sur la transformée de Fourier et sur les états liés d'un puits de potentiel à une dimension. Le chapitre 7 portera sur l'intrication quantique, tandis que les deux derniers chapitres seront consacrés à l'expérience de Stern et Gerlach et à la résonance magnétique nucléaire.

Bien entendu, cet enseignement ne constitue qu'une première introduction à la physique quantique. Les élèves souhaitant approfondir cette discipline fascinante sont invités à poursuivre en deuxième année du cycle ingénieur avec le cours de physique quantique avancée dispensé par Landry Bretheau, Antoine Browaeys et Jean-Damien Pillet, ainsi qu'avec le cours de physique statistique dispensé par Rémi Monasson, et bien sûr en troisième année avec les nombreux cours proposés par le département de physique dont une bonne part constitue des applications de la physique quantique dans des domaines très variés. On pourra également consulter nombre d'ouvrages plus approfondis que ce document [1, 2, 3, 9, 10].

Chapitre 1

Dualité onde-corpuscule

A l'aube de la révolution scientifique qui mènera à l'avènement de la physique quantique, la théorie ondulatoire de la lumière, prônée notamment par Young et Fresnel dès le début du XIX^e siècle, a clairement triomphé de la théorie corpusculaire proposée initialement par Newton. A l'inverse, l'électron récemment découvert est considéré comme un corpuscule. Cette partition ne va pas résister à l'épreuve des expériences menées au début du XX^e siècle. Ainsi, les *photons*, constituants corpusculaires de la lumière, comme les électrons, peuvent tous deux manifester des propriétés corpusculaires ou ondulatoires, selon les conditions expérimentales. Cette *dualité onde-corpuscule* a joué un grand rôle dans l'histoire de la physique quantique, et fait l'objet de ce chapitre introductif. Toutefois, avant de rentrer dans le vif du sujet, nous allons rappeler quelques notions de mécanique classique et de physique ondulatoire qu'il sera nécessaire de maîtriser pour une bonne compréhension de cet enseignement de physique quantique.

1.1 Éléments de mécanique classique et de physique ondulatoire

1.1.1 Mécanique classique

L'état d'un système physique à un instant donné est caractérisé par l'ensemble des informations nécessaires pour décrire complètement ce système à l'instant considéré. L'évolution ultérieure du système est alors gouvernée par des lois physiques permettant de déterminer l'état à tout instant à partir de l'état à l'instant initial. En mécanique classique, l'état d'une particule ponctuelle de masse m à l'instant t est ainsi déterminé par la position

$$\vec{r}(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \\ z(t) \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

et la vitesse de la particule

$$\vec{v}(t) = \dot{\vec{r}}(t) = \frac{d\vec{r}}{dt} = \begin{pmatrix} v_x(t) \\ v_y(t) \\ v_z(t) \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

A la place de la vitesse, on utilisera plus souvent la quantité de mouvement $\vec{p} = m\vec{v}$, encore appelée *impulsion*. L'état de notre particule ponctuelle à l'instant t est ainsi déterminé par la donnée des six nombres réels $\{x(t), y(t), z(t), p_x(t), p_y(t), p_z(t)\}$ que l'on pourra encore noter $\{\vec{r}(t), \vec{p}(t)\}$. La

connaissance de l'état du système permet de calculer diverses grandeurs physiques, comme par exemple l'énergie totale

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}), \quad (1.3)$$

où le premier terme correspond à l'énergie cinétique et le second terme à l'énergie potentielle $V(\vec{r})$, dont dérive la force exercée sur notre particule ponctuelle. Dans ce cours, l'énergie potentielle $V(\vec{r})$ sera simplement appelée *potentiel*, sauf lorsqu'il y aura risque de confusion avec le potentiel électrique. L'évolution du système est alors gouvernée par le principe fondamental de la dynamique, encore appelé deuxième loi de Newton :

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -\vec{\nabla} V(\vec{r}, t). \quad (1.4)$$

Le membre de gauche correspond à la masse de la particule multipliée par son accélération (ce que l'on peut encore écrire $d\vec{p}/dt$), tandis que le membre de droite, $-\vec{\nabla} V$, correspond à la force exercée sur la particule. On peut reformuler cette équation différentielle du second ordre à l'aide d'un système de deux équations différentielles du premier ordre, que l'on appelle les équations de Hamilton-Jacobi,

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\partial E}{\partial \vec{p}} \quad (1.5)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) = -\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial \vec{r}} = -\frac{\partial E}{\partial \vec{r}} \quad (1.6)$$

La première de ces deux équations n'est autre que la définition même de l'impulsion, tandis que la seconde gouverne l'évolution de l'impulsion au cours du temps. La formulation en termes d'équations de Hamilton-Jacobi présente l'avantage de traduire l'évolution du système directement sous la forme d'une équation différentielle du premier ordre, dont les mathématiques nous disent qu'il existe une et une seule solution lorsque l'état $\{\vec{r}(t_0), \vec{p}(t_0)\}$ à un instant initial t_0 est connu.

1.1.2 Physique ondulatoire

De manière générale, on appelle onde (ou *wave* en anglais) une perturbation d'un système physique qui se propage dans l'espace à une vitesse finie, comme par exemple une vague à la surface de l'eau. Même si cette perturbation consiste souvent en une déformation d'un milieu matériel, il existe également des ondes pouvant se propager dans le vide, comme les ondes électromagnétiques ou les ondes gravitationnelles.

Pour fixer les idées, considérons le cas d'une onde obéissant à l'équation de d'Alembert, qui est souvent utilisée comme une première approximation valable lorsque la dispersion de l'onde peut être négligée. Cette équation s'écrit

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 s}{\partial t^2} = \Delta s(\vec{r}, t) = \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial z^2}, \quad (1.7)$$

où s est la grandeur considérée, par exemple une composante cartésienne du champ électrique dans le cas d'une onde électromagnétique (voir annexe B.1). La grandeur c est un nombre réel ayant la

dimension d'une vitesse. Considérons l'onde monochromatique

$$s(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{-i\omega t}, \quad (1.8)$$

où ω est la pulsation (ou fréquence angulaire) et $\varphi(\vec{r})$ est une fonction complexe appropriée. On remarque qu'une telle fonction est une fonction périodique de période $T = 2\pi/\omega$. Au sens strict, la *fréquence* s'écrit $\nu = 1/T = \omega/(2\pi)$, même s'il arrive souvent que par abus de langage on parle aussi de fréquence pour faire référence à la fréquence angulaire ω . Toutefois, pour éviter toute ambiguïté, on prendra soin de réserver le Hertz (Hz) à la fréquence ν , tandis qu'on exprimera toujours ω en rad/s ou simplement en s^{-1} . La fonction $s(\vec{r}, t)$ donnée par l'éq. 1.8 présente la propriété remarquable d'être une fonction propre de l'opérateur différentiel $\partial/\partial t$, soit

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -i\omega s(\vec{r}, t), \quad (1.9)$$

ce qui constitue tout l'intérêt de la notation complexe (même quand les grandeurs physiques considérées *in fine* sont réelles). On en déduit la dérivée seconde

$$\frac{\partial^2 s}{\partial t^2} = (-i\omega)^2 s(\vec{r}, t) = -\omega^2 s(\vec{r}, t). \quad (1.10)$$

En remplaçant dans l'éq. 1.7 l'expression de $s(\vec{r}, t)$ donnée par l'éq. 1.8, on obtient alors l'équation de Helmholtz

$$\left(\Delta + \frac{\omega^2}{c^2}\right) \varphi(\vec{r}) = 0. \quad (1.11)$$

Considérons maintenant le cas d'une onde plane associée au vecteur d'onde $\vec{k}$,

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \varphi_0 e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}. \quad (1.12)$$

Cette fonction est une fonction propre de l'opérateur $\vec{\nabla}$, soit $\partial\varphi/\partial x = ik_x\varphi$ et $\partial^2\varphi/\partial x^2 = -k_x^2\varphi$. Le Laplacien s'écrit alors $\Delta\varphi = \vec{\nabla}^2\varphi = -(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\varphi$, de sorte que l'équation de Helmholtz se résume simplement à la condition

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}. \quad (1.13)$$

L'onde plane $\varphi(\vec{r}) = \varphi_0 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ est donc solution de l'équation de Helmholtz dès lors que le vecteur d'onde $\vec{k}$ est situé sur une sphère de rayon $k = \omega/c$, ce qui correspond pour $s(\vec{r}, t)$ à l'onde plane monochromatique

$$s(\vec{r}, t) = \varphi_0 \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)). \quad (1.14)$$

À l'instar de la période temporelle $T = 2\pi/\omega$ déjà mentionnée plus haut, on peut remarquer que cette fonction présente selon la direction déterminée par le vecteur d'onde $\vec{k}$ une période spatiale, appelée *longueur d'onde*, ayant pour valeur

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{c}{\nu}. \quad (1.15)$$

En effet, la fonction est inchangée si on remplace $\vec{r}$ par $\vec{r} + \lambda \vec{k}/k$. Si nous choisissons l'axe z orienté dans la direction du vecteur d'onde $\vec{k}$, seule la composante $k_z = k$ est non nulle de sorte que l'onde (représentée Fig. 1.1) peut simplement s'écrire

$$s(\vec{r}, t) = \varphi_0 \exp(i(kz - \omega t)) = \varphi_0 \exp(ik(z - ct)) = \varphi_0 \exp\left(-i\omega\left(t - \frac{z}{c}\right)\right). \quad (1.16)$$

Cette expression nous permet de reconnaître en c la vitesse de propagation de l'onde.

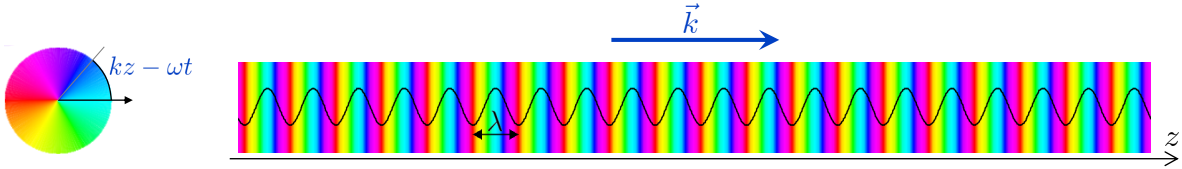


FIGURE 1.1 – Représentation d'une onde plane monochromatique $s(\vec{r}, t) = \varphi_0 \exp(i(kz - \omega t))$ se propageant selon l'axe z , la phase étant représentée selon le code couleur figurant à gauche, qui sera utilisé tout au long de ce cours. La courbe représentée en trait plein correspond à $\text{Re } s(\vec{r}, t) = \varphi_0 \cos(kz - \omega t)$.

Une onde plane monochromatique, emplissant tout l'univers dans l'espace et le temps, constitue bien entendu une idéalisation mathématique. Toutefois, nous verrons au chapitre 5 que la transformée de Fourier permet d'écrire toute fonction de l'espace et du temps comme une superposition d'ondes planes monochromatiques, ce qui constitue l'intérêt principal de cette famille de solutions de l'équation de d'Alembert. De plus, l'onde plane monochromatique constitue souvent une bonne approximation d'une situation physique réelle, par exemple pour décrire un faisceau laser quasi-monochromatique dont la section transverse est très grande devant la longueur d'onde λ .

La structure oscillante d'une onde peut être directement observable, par exemple dans le cas des vagues à la surface de l'eau pour lesquelles la longueur d'onde est de l'ordre du mètre et la fréquence de l'ordre du Hertz, ce qui donne une évolution directement perceptible par nos sens. Ce n'est pas le cas des ondes sonores, en raison de fréquences de l'ordre de quelques centaines de Hertz ou plus. Toutefois, un appareillage sommaire comme un microphone connecté à un oscilloscope permet de mettre facilement en évidence l'oscillation de la pression de l'air et de révéler la nature ondulatoire du phénomène. Il en va de même pour les ondes électromagnétiques de basse fréquence, comme les ondes radio. Mais pour des ondes électromagnétiques de plus haute fréquence, comme la lumière, une acquisition directe du signal oscillant demande un appareillage d'une tout autre complexité [11]. En effet, la longueur d'onde, comprise entre 0.4 et 0.8 μm pour la lumière visible, est alors beaucoup plus courte. De même, la période, de l'ordre de quelques femtosecondes (10^{-15} s), est beaucoup trop petite pour être directement mesurable à l'aide d'un dispositif purement électronique. Dans une telle situation, on peut malgré tout révéler la nature ondulatoire du phénomène à l'aide d'un dispositif donnant lieu à ce qu'on appelle des *interférences*. Celles-ci se produisent lorsque deux ondes au moins sont superposées, comme par exemple dans l'expérience des fentes d'Young représentée Fig. 1.2. Cette expérience consiste à observer la figure d'interférence produite sur un écran situé à une distance D d'un autre écran percé de deux fentes espacées d'une distance a , avec $a \ll D$. Ainsi, pour un point de coordonnée transverse x sur l'écran d'observation, l'onde issue de la fente

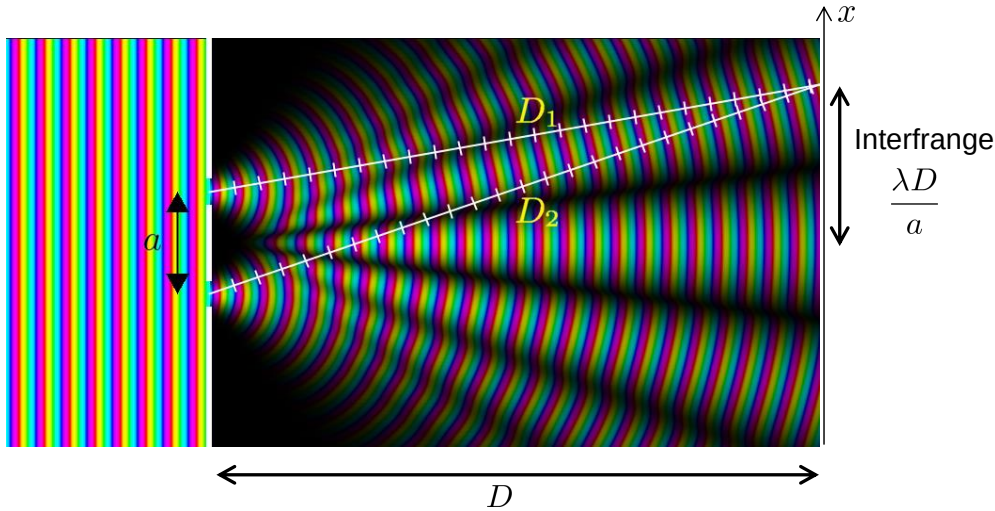


FIGURE 1.2 – *Expérience des fentes d’Young.* Une onde plane monochromatique (à gauche) se propageant vers la droite est diffractée par deux fentes espacées d’une distance a , de sorte que les ondes issues des deux fentes se recouvrent sur un écran situé à une distance D des fentes. Simulation numérique effectuée dans le cadre de l’approximation paraxiale décrite à l’annexe B.2.

numéro 1, située à une abscisse transverse $x' = a/2$, aura parcouru la distance

$$D_1 = \sqrt{D^2 + \left(x - \frac{a}{2}\right)^2} = D \left(1 + \frac{\left(x - \frac{a}{2}\right)^2}{D^2}\right)^{1/2} \approx D + \frac{\left(x - \frac{a}{2}\right)^2}{2D}, \quad (1.17)$$

tandis que l’onde issue de la fente numéro 2, située à une abscisse transverse $x' = -a/2$, aura parcouru la distance

$$D_2 = \sqrt{D^2 + \left(x + \frac{a}{2}\right)^2} = D \left(1 + \frac{\left(x + \frac{a}{2}\right)^2}{D^2}\right)^{1/2} \approx D + \frac{\left(x + \frac{a}{2}\right)^2}{2D}. \quad (1.18)$$

Les deux ondes auront donc parcouru des distances différant d’une quantité

$$D_2 - D_1 \approx \frac{\left(x + \frac{a}{2}\right)^2 - \left(x - \frac{a}{2}\right)^2}{2D} = \frac{ax}{D}. \quad (1.19)$$

Il en résultera une différence de phase accumulée $k(D_2 - D_1) = kax/D = 2\pi ax/(D\lambda)$, qui sera multiple de 2π à chaque fois que x sera multiple d’une quantité appelée *interfrange* et égale à $\lambda D/a$. Ainsi, pour les distances D_1 et D_2 représentées Fig. 1.2, les chemins issus des deux fentes diffèrent exactement d’une longueur d’onde λ , de sorte que les deux ondes ont toujours la même phase et vont donc s’ajouter à tout instant. On dit qu’elles interfèrent constructivement, ce qui donne une frange brillante. À l’inverse, lorsque x est un multiple demi-entier⁽ⁱ⁾ de l’interfrange, les deux ondes seront en opposition de phase, de sorte que leur somme sera voisine de zéro. On dit que les deux ondes interfèrent destructivement, ce qui donne une frange sombre. La figure observée sur l’écran sera donc constituée de franges alternativement brillantes et sombres, la période étant l’interfrange $\lambda D/a$. On comprend ainsi comment le phénomène d’interférence permet de révéler la

⁽ⁱ⁾ On appellera demi-entier la moitié d’un nombre entier impair, comme $1/2$, $3/2$, $5/2$, etc.

nature ondulatoire sous-jacente, et ce même si la période T est extrêmement petite, car la position des franges ne dépend pas du temps. De même, grâce au facteur multiplicatif D/a , qui peut être typiquement de l'ordre de 1000 pour des fentes espacées de $a = 1$ mm et une distance d'observation D de l'ordre du mètre, les franges seront facilement observable à l'œil nu malgré une longueur d'onde de la lumière visible inférieure au micron. C'est ainsi que Young a pu évaluer la longueur d'onde de la lumière visible. On pourra se familiariser avec ce phénomène d'interférence à l'aide de la simulation www.quantum-physics.polytechnique.fr/young.php.

1.2 Des quanta de Planck aux ondes de de Broglie

Au début du XX^e siècle le triomphe de la physique classique paraît incontestable. On peut notamment citer le succès de la thermodynamique, celui de la mécanique, capable de prévoir le mouvement des planètes avec une extrême précision, ainsi que l'unification des phénomènes électromagnétiques établie par Maxwell. Ce succès scientifique est également un succès technologique, à l'origine de la révolution industrielle. Néanmoins, quelques difficultés restent insurmontables dans le cadre de la physique classique, comme par exemple le résultat inattendu de l'expérience de Michelson-Morley, qui ne pourra être expliqué qu'à l'aide d'une théorie entièrement nouvelle : la relativité restreinte d'Albert Einstein. Une autre difficulté de taille porte sur l'explication du spectre du rayonnement du corps noir, objet idéal ayant pour caractéristique d'absorber la totalité du rayonnement auquel il est soumis. Afin qu'un tel corps atteigne une température d'équilibre finie, il est nécessaire qu'il émette un rayonnement, appelé rayonnement du corps noir, dont la puissance est une fonction croissante de sa température, en l'occurrence proportionnelle à T^4 selon la loi de Stefan-Boltzmann.

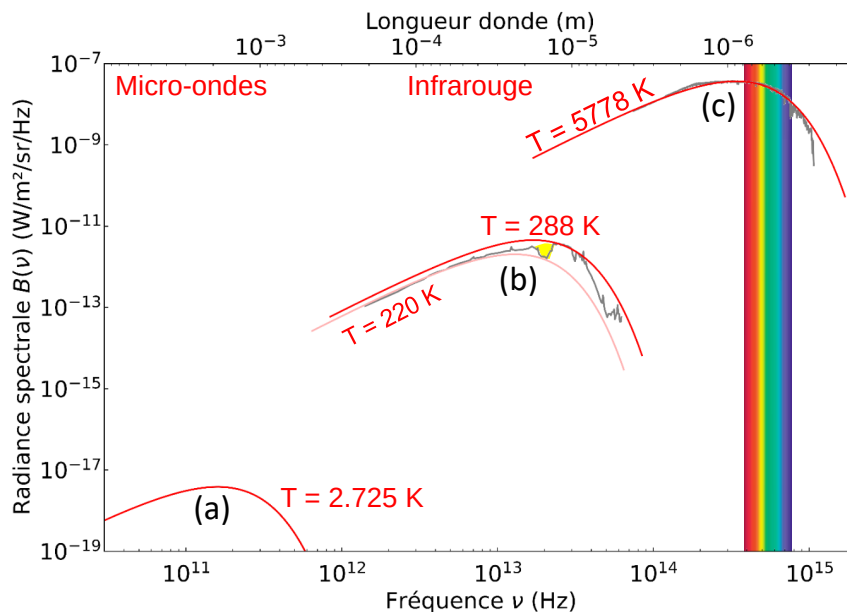


FIGURE 1.3 – Représentation en échelle logarithmique du rayonnement associé au fond diffus cosmologique (a), à la Terre (b) et au Soleil (c). La courbe en gris correspond à la mesure expérimentale tandis que la courbe en rouge correspond à la loi universelle de Planck définie par l'éq. 1.20 pour la température T indiquée. La courbe expérimentale est invisible dans le cas (a) car elle est parfaitement recouverte par la courbe théorique.

Comme le montre la Fig. 1.3, l'expérience montre que la distribution spectrale $B(\nu)$ du rayonnement émis par un corps noir obéit à une loi universelle ne dépendant que de la température T du corps. Dans le cas de la Terre, l'écart important entre le spectre émis et le spectre du corps noir est dû à l'absorption par les gaz à effet de serre du rayonnement infrarouge émis par la surface terrestre, à une température moyenne $T = 288\text{ K}$. On distingue notamment la bande liée à l'absorption du dioxyde de carbone⁽ⁱⁱ⁾ (en jaune), dont l'augmentation régulière en raison des activités humaines est à l'origine du changement climatique. Dans les régions spectrales où le rayonnement émis par la surface terrestre est totalement absorbé par l'atmosphère, on retrouve le rayonnement du corps noir émis par la couche supérieure de l'atmosphère, correspondant à une température beaucoup plus basse, $T = 220\text{ K}$.

Aucune théorie classique ne peut expliquer de manière satisfaisante la forme universelle de ce spectre du corps noir. Mais, en 1900, Max Planck établit dans un premier temps que l'expression

$$B(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1} \quad (1.20)$$

rend parfaitement compte du spectre rayonné par un corps noir à la fréquence ν . Dans cette expression, k_B est la constante de Boltzmann tandis que $h \approx 6.626 \times 10^{-34}\text{ J}\cdot\text{s}$ est une nouvelle constante fondamentale, aujourd'hui appelée constante de Planck. Dans un second temps, Planck propose une interprétation de cette loi en postulant que l'échange d'énergie entre la matière et le rayonnement à la fréquence ν ne peut se faire que par échange de *quanta* d'énergie $E = h\nu$. On peut aussi écrire un tel quantum d'énergie E à l'aide de la pulsation $\omega = 2\pi\nu$ sous la forme $E = \hbar\omega$, où $\hbar = h/2\pi$ est appelée constante de Planck réduite. Albert Einstein, tout en proposant une nouvelle explication de l'effet photo-électrique, donne une interprétation physique plus simple du rayonnement du corps noir en suggérant que ces quanta sont en fait déjà présents dans le rayonnement électromagnétique. Selon Einstein, un rayonnement électromagnétique de fréquence angulaire ω est en fait constitué de grains de lumière, que l'on appellera *photons*, dont l'énergie obéit justement à la relation $E = \hbar\omega$. C'est donc le retour inattendu d'une interprétation corpusculaire de la lumière. Dans la mesure où l'interprétation ondulatoire ne saurait pour autant être remise en cause, on voit donc apparaître le concept de *dualité onde-corpuscule* : il faut bien se résoudre à admettre que les interprétations ondulatoire et corpusculaire ne sauraient être exclusives, mais doivent co-exister puisqu'il existe certaines expériences ne pouvant être comprises que dans un cadre ondulatoire, tandis que d'autres exigent un cadre corpusculaire. Comme tout corpuscule, on peut s'attendre à ce que le photon porte une impulsion. Dans la mesure où la théorie électromagnétique prévoit qu'un faisceau lumineux possède effectivement une quantité de mouvement, dont la valeur peut se déduire des équations de Maxwell, on peut montrer que l'impulsion du photon doit obéir à la relation

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

En 1923, Louis de Broglie formule une hypothèse symétrique : si la lumière, jusque là considérée

⁽ⁱⁱ⁾L'absorption du rayonnement infrarouge par le CO_2 est un problème de physique quantique assez complexe associé à la quantification de son mouvement de vibration et de rotation. Voir www.quantum-physics.polytechnique.fr/co2.php.

comme une onde, présente un comportement corpusculaire, pourquoi la matière, habituellement associée à des corpuscules comme par exemple l'électron, ne présenterait-elle pas elle aussi un comportement ondulatoire ? Par analogie avec les expressions établies plus haut pour le photon, on peut ainsi associer un vecteur d'onde $k = p/\hbar$ à une particule d'impulsion p . Compte tenu de la relation $k = 2\pi/\lambda$ liant le vecteur d'onde à la longueur d'onde, cela revient à associer une longueur d'onde $\lambda = h/p$ à une particule d'impulsion p . Quant à la fréquence angulaire, en s'appuyant sur l'expression $E = \hbar\omega$ on peut l'écrire

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

pour une particule libre d'impulsion $p = \hbar k$. On peut ainsi introduire une fonction complexe $\psi(\vec{r}, t)$, appelée *onde de de Broglie*, construite par analogie avec la grandeur complexe associée à une onde plane monochromatique décrite par l'éq. 1.14, soit

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 \exp \left(i \left(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t \right) \right) = \psi_0 \exp \left(i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - i \frac{Et}{\hbar} \right). \quad (1.23)$$

L'hypothèse de de Broglie le conduit à prévoir que des particules de matière doivent donner lieu à des processus de diffraction et d'interférence parfaitement analogues à ceux observés pour les autres processus ondulatoires.

La confirmation de l'hypothèse de de Broglie intervient dès 1927 avec les expériences de Davisson et Germer [12] d'une part et de Thomson [13] d'autre part. La Fig. 1.4 représente le résultat d'une expérience plus récente [14], similaire à l'expérience des fentes d'Young mais effectuée avec des électrons envoyés un par un. Comme le montre la Fig. 1.4(a), qui ne représente qu'une dizaine d'impacts, chaque électron donne lieu à une tache ponctuelle, compatible avec la nature corpusculaire attendue pour cette particule. Bien que les électrons envoyés dans le dispositif soient tous préparés dans le même état, l'emplacement observé pour chaque impact est imprévisible. Néanmoins, la distribution observée après un grand nombre d'impacts, représentée Fig. 1.4(b), fait apparaître les franges d'interférence attendues, mettant en évidence la nature ondulatoire de l'électron. La page www.quantum-physics.polytechnique.fr/ysl.php vous permettra de manipuler une expérience similaire, illustrant la dualité onde-corpuscule pour la lumière et mise en place par des élèves de l'Ecole polytechnique dans le cadre de leur projet scientifique collectif [4, 5, 6]. Nous reviendrons en

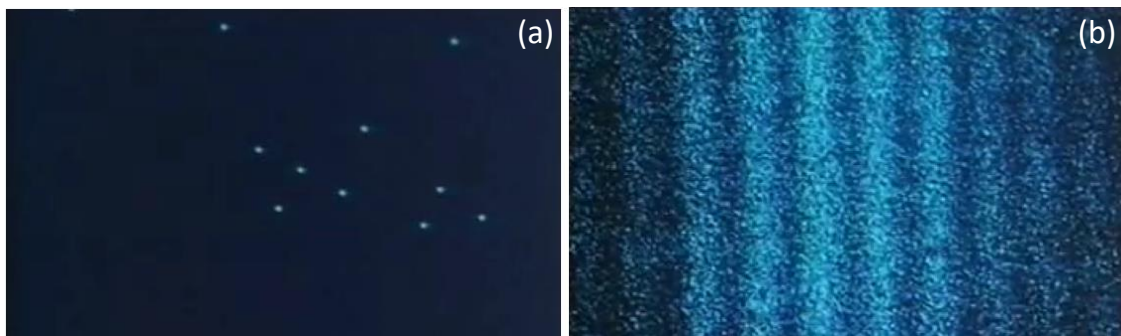


FIGURE 1.4 – *Expérience des franges d'Young effectuée avec des électrons envoyés un par un, après seulement 10 impacts (a) puis après un grand nombre d'impacts (b). Le film complet est accessible sur www.hitachi.com/rd/research/materials/quantum/movie/video2.html [14].*

5.5 sur l'analyse complète de l'expérience des fentes d'Young, qui sera plus aisée lorsque nous aurons introduit les notions de fonction d'onde (chapitre 4) et de transformation de Fourier (chapitre 5).

1.3 Interférences avec un seul photon

Pour clore ce chapitre, nous allons discuter une expérience historique effectuée en 1986 par Philippe Grangier, Gérard Roger et Alain Aspect à l'Institut d'Optique [15] montrant qu'un photon unique pouvait effectivement donner lieu à un phénomène d'interférence, démontrant ainsi dans une même expérience la nature à la fois corpusculaire et ondulatoire d'un objet quantique comme le photon. En premier lieu, il importe de réaliser qu'une source de photons uniques est très différente d'une simple source de lumière atténuée qui émettrait un très faible nombre de photons par unité de temps [16]. Pour bien comprendre la différence, considérons l'expérience représentée Fig. 1.5. Dans cette expérience, on utilise une lame dite semi-transparente ayant la propriété de séparer le faisceau en deux parties d'égales intensités grâce à un traitement diélectrique approprié déposé sur la lame lui permettant de réfléchir la moitié du faisceau tandis qu'elle transmet l'autre moitié. Si on envoie un faisceau laser ordinaire sur cette lame, on constate effectivement que chacun des deux photodétecteurs représentés Fig. 1.5 mesure le même signal, correspondant à la moitié de la puissance du faisceau incident.

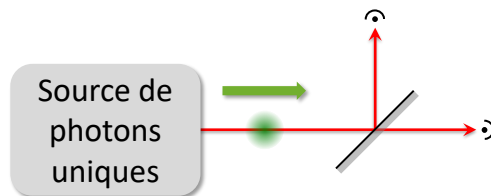


FIGURE 1.5 – Photon unique envoyé sur une lame semi-transparente.

Supposons maintenant qu'on atténue très fortement le faisceau laser incident et qu'on utilise des photodétecteurs suffisamment sensibles pour détecter des photons individuels. Notons $\mathcal{P}_1$ la probabilité qu'un détecteur mesure un photon pendant un intervalle de temps δT très court, par exemple 10 ns. Si on atténue suffisamment la source, au point que $\mathcal{P}_1 \ll 1$, on pourrait se dire que les photons sont détectés un par un. Toutefois, même dans ce régime, un calcul simple permet de montrer que la probabilité $\mathcal{P}_2$ de détecter dans l'intervalle de temps δT un photon sur chacun des deux détecteurs situés en aval de la lame semi-transparente obéit à la relation $\mathcal{P}_2 = \mathcal{P}_1^2$. Cela revient à dire que les probabilités de détection sur les deux photodétecteurs sont indépendantes, ce que l'on pourrait parfaitement expliquer dans le cadre de l'optique classique sans avoir à supposer l'existence de corpuscules comme les photons.

A l'inverse, la situation est complètement différente si à la place du laser atténué on utilise un dispositif appelé *source de photons uniques*⁽ⁱⁱⁱ⁾ capable d'envoyer des photons un par un. Si on envoie un photon unique sur la lame semi-transparente, il sera détecté par l'un des deux photodétecteurs mais jamais par les deux à la fois, ce qui correspond à $\mathcal{P}_2 = 0$. C'est effectivement ce que montre

⁽ⁱⁱⁱ⁾De telles sources sont aujourd'hui disponibles commercialement, par exemple auprès de l'entreprise Quandela, issue de recherches menées au Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies.

l'expérience [15], confirmant ainsi que le photon est un corpuscule. Bien entendu, il sera impossible de prévoir à l'avance sur lequel des deux photodétecteurs le photon sera observé. On voit ainsi comment la nature corpusculaire du photon rend incontournable la notion d'indéterminisme lors d'une mesure quantique. On est contraint d'admettre qu'il est impossible de prévoir le résultat d'une mesure individuelle. Cependant, si on répète la mesure un grand nombre de fois dans les mêmes conditions expérimentales, alors on détecte en moyenne autant de photons de chaque côté de la lame semi-transparente, en accord avec le résultat obtenu en optique classique. C'est ce qu'on appelle le *principe de correspondance* : on s'attend à retrouver les résultats de la physique classique à l'échelle macroscopique.

Une interprétation naïve de l'expérience discutée ci-dessus consisterait à dire qu'un photon incident a une chance sur deux d'être transmis et une chance sur deux d'être réfléchi par la lame semi-transparente. Afin de tester la validité de cette interprétation, considérons l'expérience représentée Fig. 1.6 utilisant un montage optique appelé *interféromètre de Mach-Zehnder*. Le faisceau incident est séparé en deux bras à l'aide d'une première lame semi-transparente puis chacun des deux bras est redirigé à l'aide de miroirs vers une seconde lame semi-transparente permettant de recombinaison des deux faisceaux. De plus, une platine de translation permet de déplacer très précisément l'un des miroirs de l'interféromètre. Pour un déplacement x du miroir, on augmente le chemin optique parcouru par la lumière sur ce bras d'une quantité $\delta = \sqrt{2}x$ (compte tenu de l'angle d'incidence de $\pi/4$ sur le miroir). On obtient ainsi un déphasage $\phi = k\delta$ entre les deux bras de l'interféromètre. Un déplacement δ de l'ordre la longueur d'onde, soit une fraction de micron pour la lumière visible, permet ainsi d'ajuster continuellement la phase ϕ dans l'intervalle $[0, 2\pi]$. Le décalage latéral du faisceau, également visible sur la Fig. 1.6, est ainsi négligeable devant la section transverse du faisceau, typiquement de l'ordre du mm.

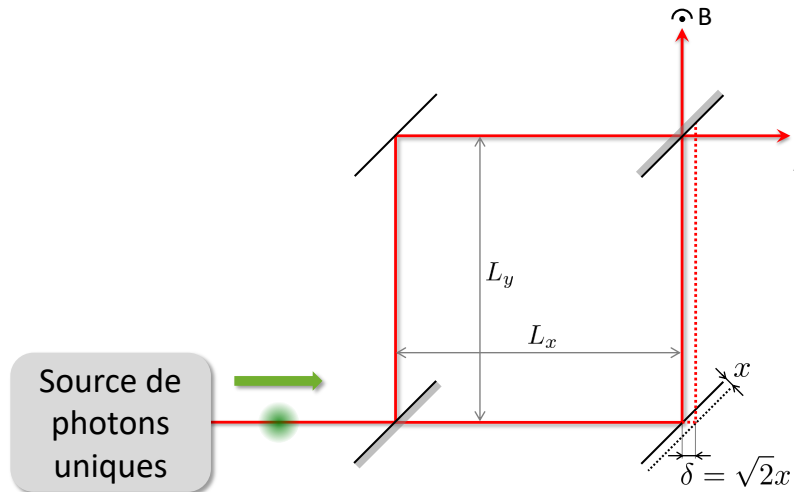


FIGURE 1.6 – *Interféromètre de Mach-Zehnder utilisé avec une source de photons uniques.*

Commençons par traiter le problème dans le cadre de l'optique classique. En appelant $\mathcal{E}_0$ l'amplitude du champ complexe avant la première lame semi-transparente, l'amplitude du champ dans chacun des bras est alors égale à $\mathcal{E}_0/\sqrt{2}$, ce qui correspond bien à une intensité lumineuse divisée par 2 dans chacun des bras, cette dernière étant proportionnelle au carré du module du champ. Si

on appelle $L = L_x + L_y$ le chemin parcouru dans l'interféromètre, les deux faisceaux parcourent des distances respectives L et $L + \delta$. En divisant encore par $\sqrt{2}$ après transmission ou réflexion par la seconde lame semi-transparente, on obtient un champ

$$\mathcal{E}_A = \frac{\mathcal{E}_0}{2} e^{ikL} + \frac{\mathcal{E}_0}{2} e^{ik(L+\delta)} \quad (1.24)$$

se dirigeant vers le détecteur appelé A, donnant lieu à une intensité proportionnelle à

$$|\mathcal{E}_A|^2 = \frac{|\mathcal{E}_0|^2}{4} |1 + e^{i\phi}|^2 = \frac{|\mathcal{E}_0|^2}{2} (1 + \cos \phi). \quad (1.25)$$

On aura de même

$$\mathcal{E}_B = -\frac{\mathcal{E}_0}{2} e^{ikL} + \frac{\mathcal{E}_0}{2} e^{ik(L+\delta)} \quad (1.26)$$

pour le champ associé au faisceau se dirigeant vers le détecteur appelé B, donnant lieu à une intensité proportionnelle à

$$|\mathcal{E}_B|^2 = \frac{|\mathcal{E}_0|^2}{4} |1 - e^{i\phi}|^2 = \frac{|\mathcal{E}_0|^2}{2} (1 - \cos \phi). \quad (1.27)$$

On notera que le signe négatif apparaissant devant le premier terme de l'éq. 1.26 est nécessaire pour assurer la conservation de l'énergie, de sorte que $|\mathcal{E}_A|^2 + |\mathcal{E}_B|^2 = |\mathcal{E}_0|^2$. La somme des intensités lumineuses issues des sorties A et B de l'interféromètre est ainsi bien égale à l'intensité lumineuse à l'entrée de l'interféromètre. Mais la répartition entre les deux sorties varie de manière sinusoïdale en fonction de la phase $\phi = k\delta = 2\pi\delta/\lambda$. On s'attend donc à observer une variation sinusoïdale en fonction de la différence de marche δ avec une période égale à la longueur d'onde λ . Dans le cas où la phase ϕ est nulle modulo 2π , on aura une interférence constructive en direction de la sortie A de l'interféromètre, vers laquelle sera dirigé l'ensemble du faisceau incident, tandis qu'on aura une interférence destructive vers la sortie B. A l'inverse, dans le cas où la phase ϕ est égale à π modulo 2π , l'intensité en direction de la sortie A sera nulle en raison d'une interférence destructive, tandis qu'on aura une interférence constructive vers la sortie B où sera dirigée la totalité du faisceau incident^(iv). Ces prédictions de l'optique classique sont bien entendu parfaitement vérifiées lorsqu'on réalise l'expérience avec un faisceau laser et que l'on mesure la puissance sur les deux voies de sortie en fonction de la différence de marche entre les deux bras de l'interféromètre.

Supposons maintenant que l'on envoie un seul photon à l'entrée de l'interféromètre. Si on reprenait l'interprétation naïve évoquée plus haut, on pourrait considérer que le photon a une chance sur deux de passer par l'un ou l'autre des deux bras. En arrivant sur la seconde lame semi-transparente, le photon aurait à nouveau une chance sur deux d'être transmis ou réfléchi, de sorte que le photon incident aurait une chance sur deux d'être détecté sur la voie A et une chance sur deux d'être détecté sur la voie B. Cette prédiction, évidemment indépendante de la différence de marche entre les deux bras de l'interféromètre, est en contradiction flagrante avec l'expérience réalisée à l'Institut d'Optique [15] et dont le résultat est représenté Fig. 1.7. Ce dernier révèle un signal périodique montrant des oscillations typiques d'un phénomène d'interférence, avec une interférence constructive vers la voie A (et destructive vers la voie B) lorsque la différence de marche est égale à 0 et destructive vers

^(iv) Des interféromètres de Mach-Zehnder développés en optique intégrée exploitant un contrôle électro-optique du déphasage ϕ sont couramment utilisés comme modulateurs optiques dans les technologies des télécommunications.

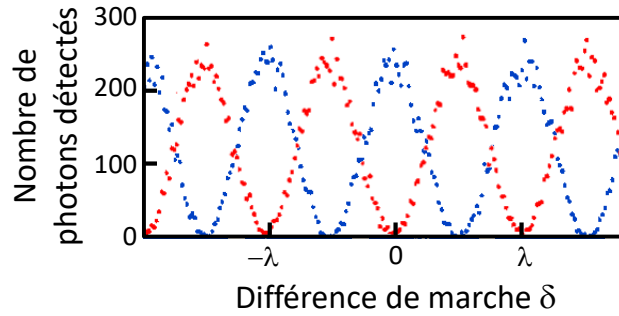


FIGURE 1.7 – Nombre de photons détectés sur les sorties A (bleu) et B (rouge) d’un interféromètre de Mach-Zehnder en fonction de la différence de marche δ entre les deux bras de l’interféromètre. Figure adaptée à partir d’un article de P. Grangier et al. [15].

la voie A (et constructive vers la voie B) lorsque la différence de marche est égale à $\lambda/2$. L’expérience invalide donc l’hypothèse simpliste proposée plus haut : il est faux d’affirmer que le photon est passé par l’un ou l’autre des deux bras de l’interfomètre. On est ainsi obligé d’admettre que le photon “passe” par les deux chemins à la fois. On doit donc lui associer une onde, similaire à l’onde associée à la propagation d’un faisceau lumineux en optique classique. Cette expérience illustre donc à la fois les propriétés corpusculaire et ondulatoire de la lumière.

En conclusion de ce chapitre sur la dualité onde-corpuscule, on pourra retenir que des objets quantiques comme le photon, l’électron ou le proton ne sont en fait ni des ondes ni des corpuscules au sens classique de ces termes, mais bien des objets quantiques d’un nouveau genre, décrits par la physique quantique que nous allons découvrir dans les prochains chapitres et qui manifestent, selon l’expérience réalisée, des comportements ondulatoire ou corpusculaire.

Chapitre 2

Polarisation d'un photon unique

Dans ce chapitre, nous allons tirer les conséquences de l'intuition d'Einstein concernant la nature corpusculaire de la lumière pour un problème simple, à savoir la polarisation d'un photon unique. Ceci nous permettra de nous familiariser dans ce cas particulier avec les trois postulats sur lesquels repose la physique quantique. Mais avant de décrire la polarisation de la lumière dans le cadre de la physique quantique, ou plus précisément de l'*optique quantique* [17], rappelons quelques éléments d'optique classique.

2.1 Polarisation de la lumière en optique classique

2.1.1 Polarisation linéaire, circulaire et elliptique

La polarisation de la lumière a été découverte dès le XVII^e siècle grâce à des cristaux anisotropes appelés biréfringents. Dans certaines conditions, ceux-ci présentent la propriété de cliver un faisceau lumineux selon ses deux états de polarisation, permettant ainsi de révéler ce nouveau degré de liberté. La notion de polarisation s'explique aisément à l'aide des équations de Maxwell (voir annexe B.1). Par exemple, dans le cas d'une onde plane de fréquence angulaire ω et de vecteur d'onde $\vec{k}$, le champ complexe s'écrit

$$\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = \vec{\mathcal{E}}_0 \exp \left(i \left(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t \right) \right), \quad (2.1)$$

le véritable champ électrique étant simplement la partie réelle du champ complexe. Comme déjà évoqué en 1.1.2, l'avantage de la notation complexe est que le champ $\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t)$ exprimé ci-dessus est une fonction propre des opérateurs de dérivation par rapport au temps ou par rapport à l'espace. On a en particulier

$$\frac{\partial}{\partial x} \mathcal{E}_x(\vec{r}, t) = ik_x \mathcal{E}_x(\vec{r}, t). \quad (2.2)$$

Compte tenu des relations similaires pour les deux autres axes, on en déduit la divergence du vecteur champ électrique

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = \frac{\partial \mathcal{E}_x(\vec{r}, t)}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{E}_y(\vec{r}, t)}{\partial y} + \frac{\partial \mathcal{E}_z(\vec{r}, t)}{\partial z} \quad (2.3)$$

$$= ik_x \mathcal{E}_x(\vec{r}, t) + ik_y \mathcal{E}_y(\vec{r}, t) + ik_z \mathcal{E}_z(\vec{r}, t) \quad (2.4)$$

$$= i\vec{k} \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t). \quad (2.5)$$

Or, d'après l'une des équations de Maxwell (éq. B.1), on a $\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = 0$, ce qui se traduit ici par $\vec{k} \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = 0$, ou encore

$$\vec{k} \cdot \vec{\mathcal{E}}_0 = 0. \quad (2.6)$$

On en déduit que le champ électrique et le vecteur d'onde sont orthogonaux. On dit que le champ électrique est *transverse* par rapport à la direction de propagation. Pour simplifier les notations, choisissons notre repère de sorte que le faisceau se propage selon l'axe z . L'éq. 2.6 s'écrit donc simplement $\mathcal{E}_{0z} = 0$. En supposant $\mathcal{E}_{0x}$ réel (ce qui revient à choisir convenablement l'origine de l'axe z), on peut écrire de manière générale

$$\vec{\mathcal{E}}_0 = \begin{pmatrix} E_0 \sin \theta \\ E_0 e^{i\phi} \cos \theta \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

où $E_0 \in \mathbb{R}$, $\theta \in [0, \pi/2]$ et $\phi \in [0, 2\pi[$. Lorsque $\phi = 0$ ou $\phi = \pi$ le champ $\vec{\mathcal{E}}_0$ est réel et les deux composantes cartésiennes du champ électrique sont en phase (ou en opposition de phase). En d'autres termes, le champ électrique $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{\mathcal{E}}_0 \cos(kz - \omega t)$ sera toujours proportionnel au vecteur réel $\vec{\mathcal{E}}_0$, raison pour laquelle la polarisation est dite *linéaire*. La grandeur θ représente alors l'angle entre la direction de la polarisation et l'axe vertical y . On peut avoir par exemple une polarisation linéaire horizontale, comme représenté Fig. 2.1(a) avec $\theta = \pi/2$, ou verticale, comme représenté Fig. 2.1(b) avec $\theta = 0$. Toute superposition avec des coefficients réels de ces deux états de polarisation nous donne à nouveau un état de polarisation linéaire, comme par exemple le cas représenté Fig. 2.1(c), correspondant à $\theta = \pi/4$, que l'on peut voir comme la superposition avec des poids identiques des deux états de polarisation linéaire selon x et y .

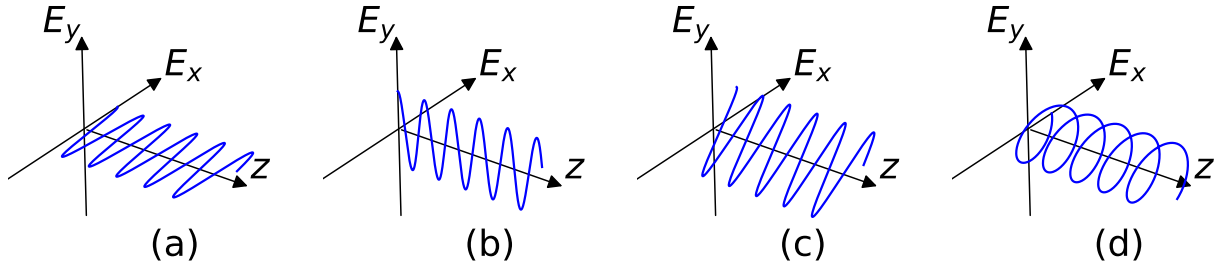


FIGURE 2.1 – Représentation à l'instant $t = 0$ des deux composantes transverse du champ électrique en fonction de la coordonnée z le long de l'axe de propagation d'une onde plane pour un faisceau polarisé (a) linéairement selon l'axe x , (b) linéairement selon l'axe y , (c) linéairement à 45° , (d) circulairement.

Dans le cas où $\mathcal{E}_{0y}$ est complexe on parlera de polarisation *elliptique* car le vecteur champ électrique décrit alors une ellipse dans le plan xy . Un cas particulier important est celui pour lequel deux composantes cartésiennes de même amplitude oscillent en quadrature, c'est à dire lorsque $\theta = \pi/4$ et $\phi = \pm\pi/2$. Dans ce cas, le champ électrique décrit un cercle et la polarisation est dite *circulaire*. Lorsque $\phi = \pi/2$, on parle de polarisation circulaire droite, ce qui correspond au cas représenté Fig. 2.1(d). A l'inverse, pour $\phi = -\pi/2$, le champ électrique décrit le même cercle mais en sens inverse et on parle de polarisation circulaire gauche.

2.1.2 Polariseurs à une et deux voies

Un *polariseur* est un dispositif utilisé soit pour préparer un état de polarisation bien défini soit pour analyser l'état de polarisation d'un faisceau lumineux. On distingue les polariseurs à une voie et les polariseurs à deux voies. Comme représenté Fig. 2.2, un polariseur à une voie est un dispositif

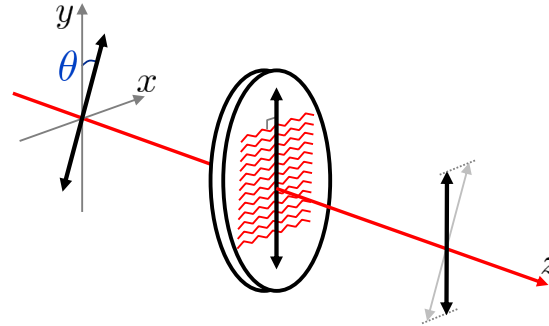


FIGURE 2.2 – Faisceau polarisé linéairement selon un angle θ par rapport à la verticale, incident sur un polariseur à une voie dont l'axe est vertical. La composante horizontale du champ électrique est totalement absorbée par les molécules représentées en rouge, de sorte que seule la polarisation verticale est transmise par le polariseur.

qui ne laisse passer qu'une seule composante cartésienne du champ électrique, orientée selon l'axe du polariseur. Un exemple bien connu est le film polaroïd, constitué d'un matériau comportant des polymères alignés selon un axe, ce qui aura pour effet d'absorber tout rayonnement associé à l'oscillation du champ électrique selon cet axe. À l'inverse, le champ oscillant perpendiculairement à cet axe n'est pas affecté et le faisceau correspondant est donc transmis. Si on envoie un faisceau non polarisé sur un tel polariseur, une seule composante cartésienne sera transmise, de sorte que le faisceau transmis sera polarisé selon l'axe du polariseur, perpendiculaire à l'axe d'alignement des polymères. La Fig. 2.2 représente l'utilisation de ce même dispositif pour analyser un faisceau déjà polarisé linéairement dans le plan xy selon un angle θ par rapport à l'axe vertical, correspondant au champ donné par l'éq. 2.7 avec $\phi = 0$ et $\theta \in]-\pi/2, \pi/2]$. Le polariseur étant orienté selon l'axe vertical y , il ne restera que la composante selon cet axe après le polariseur, d'amplitude $E_0 \cos \theta$. Sachant que la puissance d'un faisceau lumineux est proportionnelle au carré du champ électrique, qui passe ici de E_0^2 à $E_0^2 \cos^2 \theta$, on en déduit que la transmission du polariseur est égale à $\cos^2 \theta$, résultat connu sous le nom de *loi de Malus*.

Loi de Malus

Pour une lumière polarisée linéairement, la transmission d'un polariseur est égale à $\cos^2 \theta$, où θ est l'angle entre la direction de polarisation de la lumière incidente et l'axe du polariseur.

Considérons maintenant un polariseur à deux voies comme par exemple le *prisme de Rochon* représenté Fig. 2.3. Ce dispositif utilise un matériau biréfringent de type uniaxe, caractérisé par le fait que l'indice de réfraction prend une valeur appelée *indice extraordinaire* lorsque le champ électrique est parallèle à l'axe optique du matériau, cet indice étant différent de l'*indice ordinaire* perçu lorsque le champ électrique est perpendiculaire à l'axe optique. Comme le montre la Fig. 2.3, le prisme de Rochon est en réalité un assemblage de deux prismes. Pour le premier prisme, l'axe

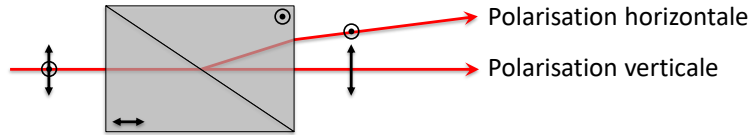


FIGURE 2.3 – Vue de côté d'un prisme de Rochon, résultant en fait de l'assemblage de deux prismes constitués d'un matériau biréfringent. Pour le premier prisme l'axe optique est parallèle au vecteur d'onde du faisceau incident tandis que pour le second prisme l'axe optique est perpendiculaire au plan d'incidence. La composante de polarisation verticale, toujours perpendiculaire à l'axe optique, se propage en ligne droite tandis que la composante de polarisation horizontale subit une légère déflexion.

optique est aligné avec l'axe de propagation du faisceau lumineux, de sorte que les deux composantes transverses du champ perçoivent le même indice, en l'occurrence l'indice ordinaire. Pour le second prisme, l'axe optique est choisi perpendiculaire au plan d'incidence⁽ⁱ⁾. Ainsi, pour la polarisation verticale, l'axe optique est à nouveau perpendiculaire au champ électrique et l'indice de réfraction est toujours égal à l'indice ordinaire. Le dioptre entre les deux prismes, de mêmes indices, n'a pas d'effet sur le faisceau lumineux qui se propage donc en ligne droite. À l'inverse, pour la polarisation horizontale, le champ électrique est aligné avec l'axe optique et c'est l'indice extraordinaire qui doit être considéré. Il y aura donc une réfraction du faisceau lumineux au niveau du dioptre entre les deux prismes et le faisceau sera dévié comme représenté sur la figure. En sortie du dispositif, il y aura donc un angle entre les faisceaux associés aux deux polarisations perpendiculaires qui pourront ainsi être séparés. Un tel polariseur à deux voies transmettra donc la totalité du faisceau incident. Si ce dernier est polarisé linéairement selon un axe faisant un angle θ par rapport à la verticale, on aura une fraction $\cos^2 \theta$ de la puissance incidente qui sera transmise en ligne droite (correspondant à une polarisation verticale) et une fraction $\sin^2 \theta$ qui sera défléchie (correspondant à la polarisation horizontale). Cette répartition de la puissance entre les deux voies généralise la loi de Malus au cas d'un polariseur à deux voies.

Un autre exemple de polariseur à deux voies est le cube séparateur de polarisation représenté Fig. 2.4. Dans le cas d'un dioptre vertical entre les deux prismes constituant le cube, c'est alors la composante de polarisation horizontale qui est transmise en ligne droite, tandis que la composante de polarisation verticale est réfléchie à angle droit.

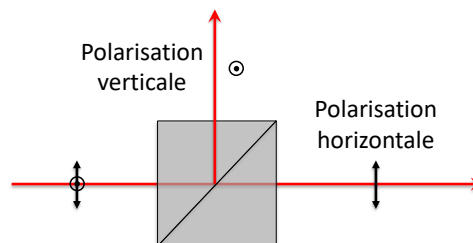


FIGURE 2.4 – Vue de haut d'un cube séparateur de polarisation, constitué d'un matériau biréfringent très mince placé entre deux prismes. La composante horizontale se propage en ligne droite tandis que la polarisation verticale est réfléchie à angle droit.

⁽ⁱ⁾ Le plan d'incidence est défini comme le plan contenant le vecteur d'onde et la normale au plan (appelé dioptre) séparant les deux milieux.

2.1.3 Interférométrie en polarisation

Considérons maintenant un interféromètre de Mach-Zehnder, comme celui considéré en 1.3, mais où nous avons remplacé les deux lames semi-transparentes par des cubes séparateurs de polarisation. Le dispositif ainsi constitué, représenté Fig. 2.5, est appelé interféromètre en polarisation. Le

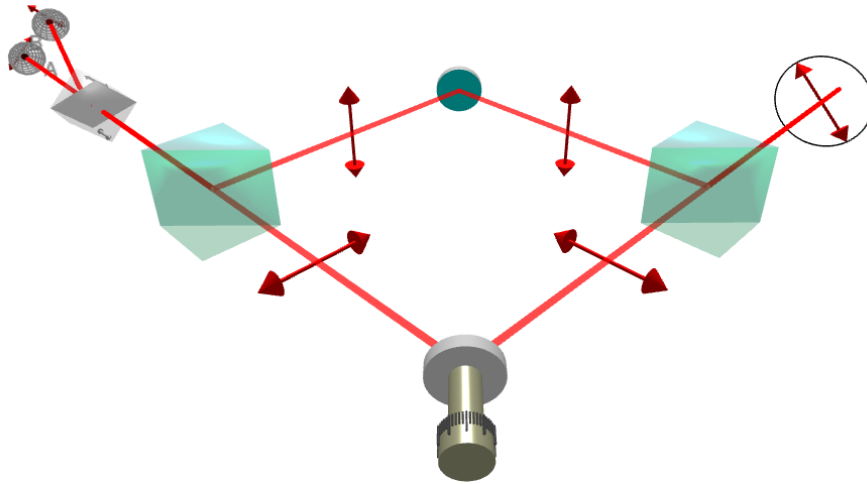


FIGURE 2.5 – *Interféromètre en polarisation. Image extraite de www.quantum-physics.polytechnique.fr/interpolar.php.*

faisceau incident, polarisé selon un angle θ par rapport à la verticale, est séparé en deux par le premier cube séparateur de polarisation, puis les deux faisceaux sont recombinaés à l'aide du second cube séparateur de polarisation. La différence de marche δ entre les deux bras de l'interféromètre peut être contrôlée précisément à l'aide d'une platine micrométrique. La polarisation du faisceau ainsi produit en sortie de l'interféromètre peut être mesurée à l'aide d'un prisme de Rochon faisant un angle α par rapport à la verticale. Compte tenu de la différence de marche δ entre les deux bras de l'interféromètre, et du déphasage $\phi = k\delta$ en résultant, le champ en sortie de l'interféromètre peut s'écrire

$$\vec{\mathcal{E}}_{\text{out}} = \begin{pmatrix} E_0 e^{i\phi} \sin \theta \\ E_0 \cos \theta \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

La similitude avec l'éq. 2.7 montre qu'un tel dispositif permet de synthétiser n'importe quel état de polarisation selon les valeurs choisies pour θ et δ . Considérons par exemple le cas d'une différence de marche telle que $\phi = k\delta = \pi$ (modulo 2π), ce que l'on peut obtenir par exemple avec $\delta = \pi/k = \lambda/2$, où $\lambda = 2\pi/k$ est la longueur d'onde associée au faisceau lumineux. L'interféromètre a alors pour effet de changer le signe du champ électrique selon l'axe x , ce qui revient à changer θ en $-\theta$ (ou encore à faire tourner la polarisation d'un angle 2θ). Dans le cas où $\theta = \pi/4$, l'interféromètre fait ainsi basculer la polarisation d'un angle égal à $\pi/2$. Si on oriente le prisme de Rochon situé en aval selon un angle $\alpha = \pi/4$, on pourra donc diriger le faisceau sur l'un ou l'autre des deux photodétecteurs selon que $\delta = 0$ ou $\delta = \lambda/2$. Toujours dans le cas où $\theta = \pi/4$, le choix $\phi = k\delta = \pm\pi/2$ (soit par exemple $\delta = \pm\lambda/4$) produit un faisceau polarisé circulairement. On aura alors le même signal sur les deux photodétecteurs quel que soit l'angle α utilisé pour le prisme de Rochon.

2.1.4 lame à retard

L'interféromètre en polarisation que nous venons de discuter permet de synthétiser n'importe quel état de polarisation. Toutefois, cela reste un dispositif encombrant et d'un usage délicat car il est nécessaire de maintenir une différence de marche parfaitement constante entre les deux bras (à quelques dizaines de nanomètres près) si l'on veut produire un état de polarisation bien contrôlé. On préfère donc souvent utiliser un système plus compact que l'on appelle une *lame à retard* et qui repose sur l'utilisation d'un matériau biréfringent. Comme représenté Fig. 2.6, une lame à retard est une

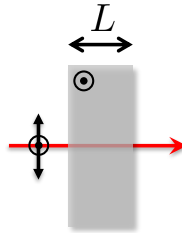


FIGURE 2.6 – Vue de côté représentant la propagation d'un faisceau lumineux à travers une lame à retard, c'est-à-dire une lame à faces parallèles constituée d'un matériau biréfringent dont l'axe optique est ici perpendiculaire au plan de la figure.

simple lame à faces parallèles constituée d'un matériau biréfringent dont l'axe optique est ici orienté selon la direction horizontale. Appelons n_o l'indice ordinaire (perçu pour la polarisation verticale car perpendiculaire à l'axe optique) et n_e l'indice extraordinaire (perçu pour la polarisation horizontale car parallèle à l'axe optique). En sortie de la lame, les polarisations verticale et horizontale seront donc affectées de phases respectivement égales à $k_o L$ et $k_e L$, où $k_o = 2\pi n_o / \lambda$ et $k_e = 2\pi n_e / \lambda$ sont les vecteurs d'onde correspondant respectivement aux indices ordinaire et extraordinaire. Pour un champ incident de polarisation linéaire faisant un angle θ avec l'axe vertical, on peut donc en déduire que le champ en sortie obéira à nouveau à l'éq. 2.8, à une phase globale $k_o L$ près sans importance et en posant $\phi = (k_e - k_o)L$. On peut facilement ajuster la phase relative ϕ entre les deux axes en choisissant une épaisseur L appropriée. On appelle lame demi-onde (resp. lame quart d'onde) une lame telle que $\phi = \pi/2$ (resp. $\pi/4$). Ces lames tirent leurs noms du fait qu'elles remplissent exactement la même fonction que l'interféromètre représenté Fig. 2.5 avec une différence de marche $\delta = \lambda/2$ ou $\lambda/4$ selon qu'il s'agit d'une lame demi-onde (encore appelée lame $\lambda/2$) ou d'une lame quart d'onde (encore appelée lame $\lambda/4$). En résumé, on pourra retenir les caractéristiques suivantes pour ces deux lames à retard.

Une **lame demi-onde (ou $\lambda/2$)** permet d'introduire un déphasage de π entre les deux composantes de polarisation d'un faisceau lumineux. Pour un faisceau incident de polarisation linéaire faisant un angle θ par rapport à l'axe de la lame, la polarisation en sortie aura donc tourné d'un angle 2θ .

Une **lame quart d'onde (ou $\lambda/4$)** permet d'introduire un déphasage de $\pi/2$ entre les deux composantes de polarisation d'un faisceau lumineux. Pour un faisceau incident de polarisation linéaire faisant un angle de $\pi/4$ par rapport à l'axe de la lame, le faisceau en sortie acquiert une polarisation circulaire. Inversement, un faisceau incident polarisé circulairement sera polarisé linéairement en sortie de la lame.

2.2 Polarisation de la lumière en optique quantique

Dans toute la suite de ce chapitre, nous supposons que nous disposons d'une source de photons uniques comme celle déjà discutée en 1.3, ce qui nous permettra d'explorer le domaine de l'optique quantique dans un cas très simple, à savoir celui où le seul degré de liberté correspond à l'état de polarisation du photon considéré. Nous supposons en outre que la source est capable de produire de manière répétitive des photons individuels, à chaque fois dans le même état de polarisation, ce qui nous permettra de déterminer les probabilités de détection en construisant des histogrammes à l'aide d'un nombre de mesures suffisamment significatif.

2.2.1 Mesure de polarisation en optique quantique

Supposons que l'on envoie notre photon vers un polariseur à deux voies, comme représenté Fig. 2.7. Si la polarisation du photon incident est verticale, on peut affirmer que le photon se propage en ligne droite à travers le prisme de Rochon, tandis qu'il est défléchi si sa polarisation est horizontale. Mais que se passe-t-il si le faisceau incident est polarisé à 45° par rapport à la verticale, correspondant à une transmission classique de 50% pour chacune des deux voies ?

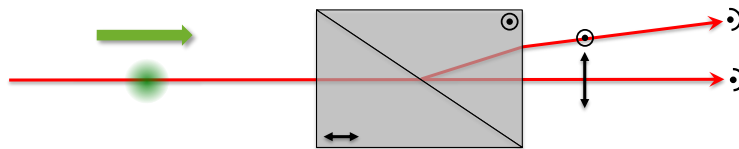


FIGURE 2.7 – Utilisation d'un prisme de Rochon avec une source de photons uniques, capable d'envoyer les photons un par un. Deux photodétecteurs placés en aval du dispositif permettent de mesurer la polarisation horizontale ou verticale de chaque photon. Voir www.quantum-physics.polytechnique.fr/polar.php.

Pour répondre à cette question, plaçons un photodétecteur sur chacune des deux voies de sortie du polariseur, comme représenté Fig. 2.7. En raison de la nature corpusculaire de la lumière, pour chaque photon incident on aura alors un événement de détection sur l'un des deux détecteurs, soit celui correspondant à la polarisation horizontale, soit celui correspondant à la polarisation verticale. Mais on n'aura jamais d'événement de détection sur les deux détecteurs à la fois car il n'y a qu'un seul photon incident. Pour un photon incident polarisé à 45° par rapport à la verticale, il sera totalement impossible de prévoir à l'avance où le photon sera effectivement détecté, exactement comme dans le cas de la lame semi-transparente considérée en 1.3. Cependant, si on répète la mesure un grand nombre de fois dans les mêmes conditions expérimentales, on détectera en moyenne autant de photons de chaque côté, en accord avec le principe de correspondance : on s'attend à retrouver les résultats de la physique classique à l'échelle macroscopique. De manière générale, pour un photon incident polarisé linéairement selon un axe faisant un angle θ par rapport à la verticale, on s'attend à un résultat aléatoire associé à des probabilités $\cos^2 \theta$ et $\sin^2 \theta$ pour les détecteurs associés aux polarisations respectivement verticale et horizontale. On sera ainsi assuré de retrouver la loi de Malus à la limite d'un grand nombre de photons détectés. La conclusion essentielle de cette expérience de pensée est qu'il est en général impossible de prévoir le résultat d'une mesure quantique individuelle. Ce n'est que pour des polarisations parfaitement verticale ($\theta = 0$) ou horizontale ($\theta = \pi/2$) que l'on pourra prévoir avec certitude où le photon sera détecté.

2.2.2 Interférométrie en polarisation

Comme dans le cas d'une lame semi-transparente, il serait incorrect d'interpréter l'expérience précédente en considérant qu'un photon incident polarisé à 45° a une chance sur deux d'être transmis et une chance sur deux d'être dévié par le polariseur à deux voies. Tant qu'il n'a pas été effectivement détecté le photon suivra en réalité les deux chemins à fois, conformément à sa nature ondulatoire. On peut s'en convaincre en considérant l'interféromètre en polarisation représenté Fig. 2.5 et déjà discuté en 2.1.3 dans le cadre de l'optique classique. Envoyons un seul photon dans l'interféromètre, le photon étant dans un état de polarisation linéaire faisant un angle $\theta = \pi/4$ par rapport à la verticale et orientons le prisme de Rochon situé en aval de l'interféromètre selon le même angle, soit $\alpha = \pi/4$. L'expérience montre que les probabilités de détection dépendent alors fortement de la valeur choisie pour la différence de marche δ entre les deux bras de l'interféromètre, comme on pourra s'en convaincre en manipulant le simulateur www.quantum-physics.polytechnique.fr/interpolar.php. En particulier, lorsque les deux chemins sont identiques ($\delta = 0$), on observe expérimentalement que la polarisation du photon transmis par l'interféromètre est la même que celle du photon incident (comme dans le cas classique), avec une probabilité de 100% de mesurer le photon sur le détecteur correspondant. Comme dans le cas de l'expérience d'interférence avec un photon unique discutée en 2.1.3, on est obligé d'admettre que le photon passe par les deux chemins à la fois et que l'état de polarisation obtenu en sortie résulte de l'interférence entre ces deux chemins. Cette interprétation est confirmée par le fait que le résultat de la mesure de polarisation dépend de la différence de marche δ entre les deux chemins, de manière similaire au graphe représenté Fig. 1.7. Par exemple, si $\delta = \lambda/2$, alors les deux composantes de polarisation sont déphasées de π , comme pour une lame demi-onde. On observe alors que le photon est toujours détecté sur l'autre détecteur placé en aval du prisme de Rochon, correspondant à une polarisation perpendiculaire. Mais pour $\delta = \lambda/4$, on observe que les probabilités de détection sont toutes deux égales à $1/2$, quelle que soit l'orientation du prisme de Rochon. Ce résultat est compatible avec la génération d'un état de polarisation circulaire. De fait, on peut constater qu'en jouant d'une part sur l'angle θ de la polarisation incidente (ce qui correspond à ajuster les poids respectifs $\cos^2 \theta$ et $\sin^2 \theta$ des polarisations verticale et horizontale), et d'autre part sur le déphasage entre ces deux composantes par l'intermédiaire de la différence de marche δ dans l'interféromètre, il est possible de synthétiser (comme en optique classique) n'importe quel état de polarisation d'un photon unique après superposition des deux composantes dans le second cube. Cette observation suggère que l'état de polarisation d'un photon unique peut être entièrement décrit comme une combinaison linéaire de deux états de base, ce qui correspond à une structure d'espace vectoriel de dimension 2 sur le corps des complexes.

2.2.3 Description de l'état de polarisation d'un photon unique

Compte tenu des éléments discutés ci-dessus, nous sommes maintenant en mesure de proposer une description vraisemblable de l'état de polarisation de notre photon unique. Comme évoqué plus haut, nous allons supposer que l'espace des états est un espace vectoriel complexe de dimension 2. Un élément de cet espace vectoriel sera appelé un *ket* et sera noté $|\psi\rangle$. Nous supposons en outre que cet espace est muni d'un produit scalaire, appelé ici produit scalaire *hermitien* car nous avons affaire à un espace vectoriel sur le corps des complexes. Cela correspond à une structure d'espace

de Hilbert, notion sur laquelle nous reviendrons lors du prochain chapitre. Les deux états de base seront notés $|\uparrow\rangle$ pour la polarisation verticale et $|\leftrightarrow\rangle$ pour la polarisation horizontale. Ces deux états seront supposés normés et orthogonaux, de sorte que $\{|\uparrow\rangle, |\leftrightarrow\rangle\}$ constitue une base orthonormée de notre espace de Hilbert, noté $\mathcal{E}_H$. Tout élément $|\psi\rangle$ de cet espace pourra donc s'écrire comme une combinaison linéaire des deux états de base avec deux coefficients complexes α et β , ce qu'on écrira sous la forme

$$|\psi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\leftrightarrow\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

où nous avons aussi écrit notre vecteur $|\psi\rangle$ sous la forme d'un vecteur colonne. Cette dernière écriture est parfaitement légitime, à condition de bien préciser la base orthonormée utilisée, ici la base $\{|\uparrow\rangle, |\leftrightarrow\rangle\}$. Si nous étions dans un espace vectoriel sur le corps des réels (comme le plan euclidien), le produit scalaire entre deux vecteurs $|\psi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\leftrightarrow\rangle$ et $|\psi'\rangle = \alpha' |\uparrow\rangle + \beta' |\leftrightarrow\rangle$ pourrait s'écrire simplement $\alpha\alpha' + \beta\beta'$. Le carré de la norme du vecteur $|\psi\rangle$ s'écrirait alors comme le produit scalaire de $|\psi\rangle$ avec lui-même, ce qui donnerait $\alpha^2 + \beta^2$, qui est bien un nombre réel positif ou nul dans le cas de coefficients réels. Mais une telle définition du produit scalaire ne convient évidemment pas dans le cas où les coefficients α et β sont complexes car le carré de la norme ne serait alors plus un nombre réel positif. Dans le cas d'un espace vectoriel sur le corps des complexes, la définition correcte du produit scalaire hermitien entre les vecteurs $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$ s'écrit en fait

$$\alpha^* \alpha' + \beta^* \beta' = (\alpha^* \beta^*) \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

où α^* et β^* sont les complexes conjugués des nombres α et β . On voit que ce produit scalaire hermitien se met sous la forme du produit d'un vecteur ligne, obtenu par transposition et conjugaison (ou transconjugaison) du vecteur colonne donné par l'éq. 2.9, par le vecteur colonne associé à $|\psi'\rangle$. Une dénomination astucieuse due à Paul Dirac consiste à appeler *bra* et à noter $\langle\psi|$ ce vecteur ligne obtenu par transconjugaison. Le bra associé au ket donné par l'éq. 2.9 s'écrira ainsi

$$\langle\psi| = \alpha^* \langle\uparrow| + \beta^* \langle\leftrightarrow| = (\alpha^* \beta^*). \quad (2.11)$$

Le produit scalaire hermitien entre les kets $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$ s'écrit alors comme un simple produit entre le bra $\langle\psi|$ et le ket $|\psi'\rangle$, soit $\langle\psi|\psi'\rangle$, ou plus simplement $\langle\psi|\psi'\rangle$ après avoir effacé l'une des deux barres verticales. C'est là l'origine de la dénomination de bras et de kets proposée par Dirac, puisque le produit d'un bra par un ket donne un *bracket*, mot anglais signifiant crochet et correspondant à des notations du type $\langle\psi|\psi'\rangle$ ou $(\psi|\psi')$.

Avec cette convention, on peut écrire le produit scalaire hermitien entre $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$ selon

$$\langle\psi|\psi'\rangle = (\alpha^* \langle\uparrow| + \beta^* \langle\leftrightarrow|) (\alpha' |\uparrow\rangle + \beta' |\leftrightarrow\rangle) \quad (2.12)$$

$$= \alpha^* \alpha' \langle\uparrow|\uparrow\rangle + \alpha^* \beta' \langle\uparrow|\leftrightarrow\rangle + \beta^* \alpha' \langle\leftrightarrow|\uparrow\rangle + \beta^* \beta' \langle\leftrightarrow|\leftrightarrow\rangle \quad (2.13)$$

$$= \alpha^* \alpha' + \beta^* \beta' \quad (2.14)$$

où l'on a utilisé l'orthogonalité des deux vecteurs de base (soit $\langle\uparrow|\leftrightarrow\rangle = \langle\leftrightarrow|\uparrow\rangle = 0$) ainsi que leur normalisation (soit $\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\leftrightarrow|\leftrightarrow\rangle = 1$). On retrouve bien de cette manière l'expression

du produit scalaire hermitien donné par l'éq. 2.10. Le produit scalaire hermitien du ket $|\psi\rangle$ avec lui-même s'écrit

$$\langle\psi|\psi\rangle = (\alpha^* \langle\uparrow| + \beta^* \langle\leftrightarrow|) (\alpha |\uparrow\rangle + \beta |\leftrightarrow\rangle) = \alpha^* \alpha' \langle\uparrow|\uparrow\rangle + \beta^* \beta' \langle\leftrightarrow|\leftrightarrow\rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2. \quad (2.15)$$

Ce nombre est positif ou nul, et n'est nul que si $\alpha = \beta = 0$, ce qui signifie que $|\psi\rangle = 0$ est alors le vecteur nul. Ces propriétés nous permettent de définir la norme du ket $|\psi\rangle$ selon l'expression

$$\| |\psi\rangle \| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}. \quad (2.16)$$

Comme attendu pour une base orthonormée, on peut obtenir les coefficients α et β du ket $|\psi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\leftrightarrow\rangle$ à l'aide du produit scalaire hermitien avec chacun des vecteurs de base. On a en effet

$$\langle\uparrow|\psi\rangle = \langle\uparrow| (\alpha |\uparrow\rangle + \beta |\leftrightarrow\rangle) = \alpha \langle\uparrow|\uparrow\rangle + \beta \langle\uparrow|\leftrightarrow\rangle = \alpha \quad (2.17)$$

et

$$\langle\leftrightarrow|\psi\rangle = \langle\leftrightarrow| (\alpha |\uparrow\rangle + \beta |\leftrightarrow\rangle) = \alpha \langle\leftrightarrow|\uparrow\rangle + \beta \langle\leftrightarrow|\leftrightarrow\rangle = \beta. \quad (2.18)$$

Comme le montre l'expérience discutée plus haut, il est possible de synthétiser un état de polarisation linéaire faisant un angle de $\pi/4$ par rapport à la verticale en superposant les états $|\uparrow\rangle$ et $|\leftrightarrow\rangle$. On peut donc essayer d'écrire l'état quantique associé à cette polarisation selon la somme des deux états de base, soit

$$|\psi\rangle = |\uparrow\rangle + |\leftrightarrow\rangle. \quad (2.19)$$

Toutefois, un tel vecteur a pour norme $\| |\psi\rangle \| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} = \sqrt{2}$. Compte tenu de l'invariance par rotation, il n'est pas raisonnable que la norme du vecteur représentant un état de polarisation linéaire faisant un angle de $\pi/4$ par rapport à la verticale diffère de celle de l'état normé $|\uparrow\rangle$. On pourra donc obtenir l'état physique associé à cet état de polarisation en divisant la superposition linéaire ci-dessus par sa norme, ce qui nous donne l'état

$$|\nearrow\rangle = \frac{|\uparrow\rangle + |\leftrightarrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (2.20)$$

De manière générale, on fera l'hypothèse qu'un ket représentant un état physique doit nécessairement être normé. D'après l'expérience discutée plus haut, on sait qu'un état polarisé à $-\pi/4$ pourra être obtenu en déphasant de π la composante de polarisation horizontale en utilisant une différence de marche $\delta = \lambda/2$ dans l'interféromètre en polarisation. Il est donc naturel d'écrire l'état correspondant sous la forme

$$|\nwarrow\rangle = \frac{|\uparrow\rangle + e^{i\pi} |\leftrightarrow\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|\uparrow\rangle - |\leftrightarrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (2.21)$$

Pour un état de polarisation linéaire faisant un angle θ par rapport à la verticale, on peut s'appuyer sur l'optique classique qui nous dit que le champ électrique associé à une telle polarisation est la superposition linéaire entre des champs de polarisation linéaire verticale et horizontale avec des amplitudes respectives $\cos \theta$ et $\sin \theta$. Pour un photon unique de polarisation linéaire faisant un angle

θ par rapport à la verticale, on pourra écrire de même l'état correspondant

$$|\theta\rangle = \cos \theta |\uparrow\rangle + \sin \theta |\leftrightarrow\rangle, \quad (2.22)$$

état qui est naturellement normé car $\cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1$. On retrouve bien les deux états $|\nearrow\rangle$ et $|\searrow\rangle$ pour $\theta = \pm\pi/4$. On pourra obtenir de même des états de polarisation circulaire droite ou gauche en superposant les deux états de base avec un déphasage relatif de $\pm\pi/2$, ce qui nous donne

$$|\pm\rangle = \frac{|\uparrow\rangle \pm i |\leftrightarrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (2.23)$$

On peut déduire de ces considérations un premier postulat portant sur la manière de décrire l'état de polarisation d'un photon unique.

Premier postulat : Description de l'état du système

L'état de polarisation d'un photon unique est entièrement décrit par un ket normé noté $|\psi\rangle$ appartenant à un espace vectoriel de dimension 2 sur le corps des complexes muni d'un produit scalaire hermitien.

Une base orthonormée possible de cet espace est constituée des deux états $|\uparrow\rangle$ et $|\leftrightarrow\rangle$ correspondant à des photons de polarisation respectivement verticale et horizontale. Un état physique quelconque pourra ainsi se mettre sous la forme

$$|\psi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\leftrightarrow\rangle, \quad (2.24)$$

où α et β sont deux coefficients complexes obéissant à la condition de normalisation $\langle\psi|\psi\rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. On aura par exemple $\alpha = \cos \theta$ et $\beta = \sin \theta$ pour l'état $|\theta\rangle$ correspondant à une polarisation linéaire faisant un angle θ par rapport à la verticale.

Il est évidemment possible d'utiliser d'autres bases orthonormées pour engendrer l'espace des états. On peut par exemple facilement vérifier que $\{|\nearrow\rangle, |\searrow\rangle\}$ constitue une base orthonormée possible car

$$\langle\nearrow|\searrow\rangle = \frac{\langle\uparrow| + \langle\leftrightarrow|}{\sqrt{2}} \frac{|\uparrow\rangle - |\leftrightarrow\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{\langle\uparrow|\uparrow\rangle - \langle\leftrightarrow|\leftrightarrow\rangle}{2} = 0. \quad (2.25)$$

Plus généralement, il en va de même pour la base orthonormée $\{|\theta\rangle, |\theta + \pi/2\rangle\}$ car

$$\langle\theta|\theta + \pi/2\rangle = (\cos \theta \langle\uparrow| + \sin \theta \langle\leftrightarrow|) (-\sin \theta |\uparrow\rangle + \cos \theta |\leftrightarrow\rangle) = 0. \quad (2.26)$$

De même, on pourra utiliser la base orthonormée $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ car

$$\langle+|-\rangle = \frac{\langle\uparrow| - i \langle\leftrightarrow|}{\sqrt{2}} \frac{|\uparrow\rangle - i |\leftrightarrow\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1 + i^2}{2} = 0, \quad (2.27)$$

où l'on n'a pas oublié de conjuguer le nombre complexe i en passant du ket $|+\rangle = (|\uparrow\rangle + i |\leftrightarrow\rangle)/\sqrt{2}$ au bra $\langle+| = (|\uparrow\rangle - i |\leftrightarrow\rangle)/\sqrt{2}$.

2.3 Mesure de l'état de polarisation d'un photon unique

2.3.1 Cas d'une mesure de polarisation linéaire

Considérons maintenant une mesure de polarisation comme celle représentée Fig. 2.7. Comme pour toute mesure de polarisation d'un photon unique, il n'y a que deux résultats possibles correspondant aux polarisations verticale et horizontale lorsque le prisme de Rochon est orienté selon la verticale. La mesure de polarisation est donc associée à deux états d'une base orthonormée, ici la base $\{|\uparrow\rangle, |\leftrightarrow\rangle\}$. Pour un photon incident préparé dans l'état $|\theta\rangle = \cos\theta |\uparrow\rangle + \sin\theta |\leftrightarrow\rangle$, nous avons vu que les probabilités associées aux deux issues possibles étaient respectivement $\mathcal{P}_{\uparrow} = \cos^2\theta$ et $\mathcal{P}_{\leftrightarrow} = \sin^2\theta$, soit les carrés des deux composantes de l'état $|\theta\rangle$ du système. Nous pouvons généraliser ce résultat à un état $|\psi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\leftrightarrow\rangle$ quelconque, défini par les nombres complexes α et β , en postulant que les probabilités associées aux deux issues possibles seront $|\alpha|^2$ et $|\beta|^2$. Une telle hypothèse est raisonnable dans la mesure où la condition de normalisation $\langle\psi|\psi\rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ est compatible avec une loi de probabilité. De plus, dans le cas d'un état de polarisation circulaire donné par l'éq. 2.23, on retrouve bien $\mathcal{P}_{\uparrow} = \mathcal{P}_{\leftrightarrow} = 1/2$, en accord tant avec l'optique classique qu'avec le résultat expérimental effectivement observé avec des photons uniques. Compte tenu des éq. 2.17 et 2.18, on peut écrire les probabilités de mesure selon les relations

$$\mathcal{P}_{\uparrow} = |\langle\uparrow|\psi\rangle|^2 \quad \text{et} \quad \mathcal{P}_{\leftrightarrow} = |\langle\leftrightarrow|\psi\rangle|^2. \quad (2.28)$$

Dans le cas où le prisme de Rochon est tourné d'un angle α par rapport à la verticale, les deux résultats de mesure sont alors associés aux états orthogonaux $|\alpha\rangle$ et $|\alpha + \pi/2\rangle$. En généralisant l'équation ci-dessus, on peut écrire les deux probabilités associées selon les expressions

$$\mathcal{P}_{\alpha} = |\langle\alpha|\psi\rangle|^2 \quad \text{et} \quad \mathcal{P}_{\alpha+\pi/2} = |\langle\alpha + \pi/2|\psi\rangle|^2. \quad (2.29)$$

Considérons le cas d'un photon incident dans l'état $|\theta\rangle = \cos\theta |\uparrow\rangle + \sin\theta |\leftrightarrow\rangle$. On obtient alors

$$\langle\alpha|\theta\rangle = (\cos\alpha \langle\uparrow| + \sin\alpha \langle\leftrightarrow|) (\cos\theta |\uparrow\rangle + \sin\theta |\leftrightarrow\rangle) \quad (2.30)$$

$$= \cos\alpha \cos\theta + \sin\alpha \sin\theta \quad (2.31)$$

$$= \cos(\theta - \alpha). \quad (2.32)$$

On en déduit $\mathcal{P}_{\alpha} = |\langle\alpha|\theta\rangle|^2 = \cos^2(\theta - \alpha)$ et $\mathcal{P}_{\alpha+\pi/2} = 1 - \mathcal{P}_{\alpha} = \sin^2(\theta - \alpha)$, en accord avec la loi de Malus puisque la probabilité de transmission est égale au carré du cosinus de la différence entre l'angle de la polarisation incidente et de celle du polariseur utilisé pour la mesure.

2.3.2 Cas d'une base de mesure arbitraire

Considérons maintenant une mesure de polarisation comme celle représentée Fig. 2.8(a) s'appuyant sur un dispositif permettant de cliver le faisceau incident correspondant à deux états de polarisation orthogonaux $|\chi\rangle$ et $|\chi'\rangle$, même lorsque ces états ne correspondent pas à des polarisations linéaires. Nous nous contentons ici de supposer l'existence d'un tel dispositif qui reste à déterminer dans le cas de polarisations qui ne sont pas linéaires, mais nous en verrons un exemple

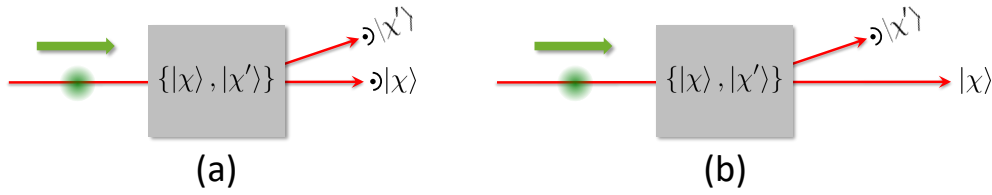


FIGURE 2.8 – (a) Mesure de polarisation dans la base orthonormée $\{|\chi\rangle, |\chi'\rangle\}$. (b) Mesure non destructive permettant de mesurer le système dans l'état $|\chi\rangle$ à chaque fois qu'on ne mesure pas le photon dans l'état orthogonal $|\chi'\rangle$.

à la fin de ce chapitre dans le cas de polarisations circulaires. En généralisant les expressions discutées plus haut dans le cas de polarisations linéaires, nous pouvons maintenant proposer un postulat portant sur la mesure de polarisation d'un photon.

Deuxième postulat : Mesure de l'état du système

Une mesure de l'état de polarisation d'un photon unique ne pourra donner que deux résultats possibles, associés à deux vecteurs d'une base orthonormée, par exemple les états $|\chi\rangle$ et $|\chi'\rangle$. Si le système est dans l'état $|\psi\rangle$, la probabilité d'obtenir les deux résultats de mesure s'écrit respectivement

$$\mathcal{P}_{|\chi\rangle} = |\langle\chi|\psi\rangle|^2 \quad (2.33)$$

et

$$\mathcal{P}_{|\chi'\rangle} = |\langle\chi'|\psi\rangle|^2 = 1 - \mathcal{P}_{|\chi\rangle}. \quad (2.34)$$

Dans le cas d'une mesure idéale, l'état du système après la mesure correspond à l'état effectivement mesuré, à savoir l'état $|\chi\rangle$ dans le premier cas et l'état $|\chi'\rangle$ dans le second cas.

Ce postulat appelle un commentaire concernant la notion de mesure idéale, ou encore non destructive. Les dispositifs de mesure discutés jusqu'ici constituent en fait des mesures destructives, puisque le photon est toujours détecté et donc détruit par l'un des deux photodétecteurs représentés Fig. 2.8(a). Dans la mesure idéale évoquée dans le postulat, on souhaiterait mesurer l'état de polarisation du photon tout en continuant à utiliser ce même photon pour des expériences ultérieures situées en aval du dispositif de mesure. Pour décrire de manière générale une telle méthode de mesure non destructive, il est en fait nécessaire d'avoir recours au concept d'*intrication*, qui ne sera abordé qu'au chapitre 7. Toutefois, nous pouvons considérer une version légèrement dégradée d'une mesure non destructive en considérant le dispositif représenté Fig. 2.8(b) où on n'utilise qu'un seul photodétecteur, correspondant à l'état $|\chi'\rangle$ orthogonal à l'état $|\chi\rangle$. On suppose que l'on dispose d'une source émettant des photons uniques à intervalle de temps réguliers, ce qui nous permet de savoir exactement à quel instant le photon peut être détecté. Si le photon est effectivement détecté à l'instant attendu dans l'état $|\chi'\rangle$ (avec la probabilité $\mathcal{P}_{|\chi'\rangle} = |\langle\chi'|\psi\rangle|^2$), alors le photon est détruit et on peut dire qu'on a mesuré – de manière destructive – le photon dans l'état $|\chi'\rangle$. Mais dans le cas d'un résultat de mesure négatif, ce qui se produit avec une probabilité $1 - \mathcal{P}_{|\chi'\rangle} = \mathcal{P}_{|\chi\rangle}$, alors l'absence de détection nous permet d'affirmer qu'on a en fait mesuré le photon dans l'état $|\chi\rangle$. Il s'agit ici d'une mesure idéale puisque l'état du photon a bien été mesuré sans que ce dernier soit

détruit. Selon le postulat de la mesure, l'état du système après cette mesure déduite d'un résultat négatif est donc l'état $|\chi\rangle$.

2.3.3 Paramètres requis pour décrire l'état de polarisation d'un photon

Il est intéressant de se poser la question du nombre de paramètres nécessaires pour décrire entièrement l'état de polarisation d'un photon. Pour cela, décomposons l'état $|\psi\rangle$ du photon dans la base $\{|\uparrow\rangle, |\leftrightarrow\rangle\}$, soit $|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\leftrightarrow\rangle$. A première vue, nous avons besoin de 4 nombres réels, correspondant aux parties réelles et imaginaires de α et β , pour caractériser l'état du système. Toutefois, ces nombres ne sont pas tous indépendants ou significatifs. D'une part, la condition de normalisation du ket $|\psi\rangle$ impose la relation $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. D'autre part, on peut remarquer que – selon le postulat de la mesure – la phase globale du ket $|\psi\rangle$ n'intervient pas dans les résultats de mesure puisque selon les éq. 2.33 et 2.34 seuls les modules des produits scalaires interviennent dans le calcul des probabilités. Cette phase globale n'est donc pas pertinente pour décrire l'état du système, ce qui revient à dire que deux kets différant d'un facteur de phase global représentent en fait le même état physique. On peut donc s'attendre à ce que deux nombres réels suffisent à décrire de manière pertinente l'état physique du système. Pour faire apparaître ces deux paramètres, écrivons $\alpha = e^{i\phi_{\uparrow}} \cos \theta$ et $\beta = e^{i\phi_{\leftrightarrow}} \sin \theta$, avec $\theta \in [0, \pi/2]$, ce qui permet d'assurer automatiquement la condition de normalisation $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Nous avons bien le droit de faire ce changement de variable puisque la fonction $\theta \mapsto \cos \theta$ est une bijection de $[0, \pi/2]$ vers $[0, 1]$, intervalle auquel appartient $|\alpha|$. Posons maintenant $\phi = (\phi_{\leftrightarrow} - \phi_{\uparrow})$. Remarquons que ϕ correspond à la phase du nombre complexe $\alpha^*\beta$, et couvre donc l'ensemble de l'intervalle $]-\pi, +\pi]$ (ou encore $[0, 2\pi[$). Avec ces notations, l'état du système devient

$$|\psi\rangle = e^{i\phi_{\uparrow}} \left(\cos \theta |\uparrow\rangle + e^{i\phi} \sin \theta |\leftrightarrow\rangle \right). \quad (2.35)$$

Enfin, sachant que la phase globale $\phi_{\uparrow}$ n'a pas de pertinence physique et peut donc être choisie égale à zéro, on peut décider d'écrire l'état du système sous la forme

$$|\psi\rangle = \cos \theta |\uparrow\rangle + e^{i\phi} \sin \theta |\leftrightarrow\rangle, \quad (2.36)$$

avec $\theta \in [0, \pi/2]$ et $\phi \in]-\pi, +\pi]$. Il est donc effectivement possible de décrire l'état de polarisation d'un photon unique à l'aide de deux nombres réels, les angles θ et ϕ . Ce résultat confirme le fait que l'interféromètre représenté Fig. 2.5 permet d'engendrer n'importe quel état de polarisation : le nombre θ représente alors l'angle entre l'axe vertical et la direction de la polarisation linéaire du photon incident tandis que le nombre ϕ représente le déphasage entre les deux bras de l'interféromètre. D'un point de vue pratique, il suffit d'envoyer en amont de l'interféromètre un photon polarisé verticalement suivi d'une lame demi-onde dont l'axe optique fait un angle $\theta/2$ par rapport à la verticale pour injecter un photon dans l'état $|\theta\rangle$ dans l'interféromètre (voir 2.4.2). On utilise alors la platine de translation représentée Fig. 2.5 pour ajuster la différence de marche δ entre les deux bras de l'interféromètre, et contrôler ainsi la phase $\phi = k\delta$ entre les deux composantes de polarisation du photon, où $k = 2\pi/\lambda$ est le vecteur d'onde du photon. À une phase globale près, l'état en sortie de l'interféromètre est alors l'état $|\psi\rangle$ donné par l'éq. 2.36.

2.4 Evolution de l'état de polarisation d'un photon unique

Pour clore ce chapitre, nous allons considérer l'évolution de l'état de polarisation de notre photon, d'abord en fonction du temps, puis en fonction de la position.

2.4.1 Evolution temporelle

L'analogie avec l'évolution classique d'une onde monochromatique en $\exp(-i\omega t)$ nous incite à supposer une évolution similaire pour l'état de polarisation d'un photon, ce qui nous conduit au postulat suivant.

Troisième postulat : Evolution temporelle de l'état du système

On considère un photon unique d'énergie $E = \hbar\omega$ dont l'état de polarisation à l'instant initial est donné par le ket $|\psi(0)\rangle$. Alors l'évolution ultérieure du système s'écrit

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t} |\psi(0)\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\psi(0)\rangle. \quad (2.37)$$

On voit donc que le seul impact de l'écoulement du temps est d'introduire un préfacteur de phase devant l'état du système. Or, comme nous l'avons vu plus haut, un tel préfacteur est sans conséquence sur les mesures que l'on pourra réaliser. Ainsi, la probabilité $\mathcal{P}(t)$ de mesurer le photon dans l'état de polarisation associé au ket $|\chi\rangle$ s'écrit

$$\mathcal{P}(t) = |\langle\chi|\psi(t)\rangle|^2 = |\langle\chi|e^{-i\omega t}|\psi(0)\rangle|^2 = |\langle\chi|\psi(0)\rangle|^2, \quad (2.38)$$

grandeur qui est bien indépendante du temps. Comme on le verra au chapitre suivant, on parle alors d'*état stationnaire* pour caractériser l'état du système, puisqu'aucune évolution temporelle ne peut être observée lors des mesures que l'on pourra effectuer. Il s'agit ici d'un cas particulier lié au fait que les deux états de polarisation sont associés à la même énergie $E = \hbar\omega$.

2.4.2 Evolution spatiale

Compte tenu de l'évolution en $\exp(i(kz - \omega t))$ d'une onde électromagnétique se propageant dans le vide, on peut s'attendre à ce que la propagation du photon le long de l'axe z sur une distance L donne lieu à un simple facteur de phase en $\exp(ikL)$. Comme pour l'évolution temporelle en $\exp(-i\omega t)$, ce facteur de phase n'a aucune conséquence sur les mesures physiques et l'évolution spatiale du système n'est *a priori* guère plus intéressante que son évolution temporelle.

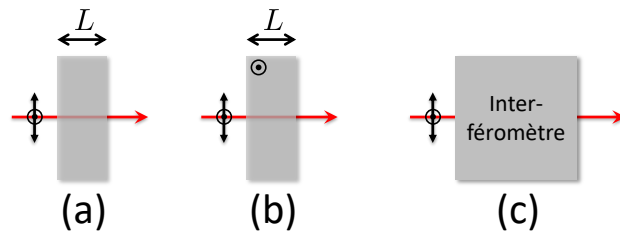


FIGURE 2.9 – Propagation de l'état de polarisation d'un photon unique à travers (a) une lame à faces parallèles constituée d'un matériau isotrope, (b) une lame à retard, (c) l'interféromètre en polarisation représenté Fig. 2.5.

Considérons maintenant la propagation du photon à travers différents systèmes comme ceux représentés Fig. 2.9 et cherchons à relier l'état $|\psi_{\text{out}}\rangle$ en sortie du système par rapport à l'état incident $|\psi_{\text{in}}\rangle$. Dans le cas de la lame à faces parallèles constituée d'un matériau isotrope représentée Fig. 2.9(a), on pourra écrire simplement

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = e^{ikL} |\psi_{\text{in}}\rangle, \quad (2.39)$$

où L est l'épaisseur de la lame et $k = n\omega/c$ est maintenant le vecteur d'onde dans le matériau, avec n l'indice de réfraction du matériau. On obtient à nouveau un simple facteur de phase sans conséquence physique. Le problème devient toutefois plus intéressant si on considère la propagation à travers un matériau biréfringent, c'est-à-dire une lame à retard comme celle représentée Fig. 2.9(b). En reprenant les notations introduite en 2.1.4 lors de l'étude classique d'une telle lame à retard, on peut considérer qu'un état incident $|\uparrow\rangle$ deviendra $\exp(ik_o L) |\uparrow\rangle$, de même qu'un état $|\leftrightarrow\rangle$ deviendra $\exp(ik_e L) |\leftrightarrow\rangle$. Par superposition linéaire, on peut en déduire qu'un état $|\psi_{\text{in}}\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\leftrightarrow\rangle$ deviendra

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = \alpha e^{ik_o L} |\uparrow\rangle + \beta e^{ik_e L} |\leftrightarrow\rangle. \quad (2.40)$$

En appelant $\phi = (k_e - k_o)L$ le déphasage introduit par la lame à retard, on peut donc écrire

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = e^{ik_o L} \left(\alpha |\uparrow\rangle + \beta e^{i\phi} |\leftrightarrow\rangle \right). \quad (2.41)$$

Le préfacteur de phase global $e^{ik_o L}$ n'ayant pas de conséquence physique, on pourra l'omettre et écrire simplement

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta e^{i\phi} |\leftrightarrow\rangle. \quad (2.42)$$

Enfin, compte tenu de l'équivalence discutée en 2.1 entre une lame à retard et un interféromètre en polarisation introduisant un déphasage $\phi = k\delta$ entre les deux polarisations, on pourra considérer que l'effet de l'interféromètre représenté Fig. 2.9(c) produit lui aussi l'état défini par l'éq. 2.42.

Ces résultats permettent de vérifier qu'un interféromètre en polarisation ou une lame à retard ont les mêmes effets sur un photon unique que ceux que nous avons établis dans le cadre de l'optique classique. Par exemple, l'action d'une lame demi-onde ($\phi = \pi$) sur l'état $|\theta\rangle = \cos\theta |\uparrow\rangle + \sin\theta |\leftrightarrow\rangle$ donne l'état $|\psi_{\text{out}}\rangle = \cos\theta |\uparrow\rangle + e^{i\pi} \sin\theta |\leftrightarrow\rangle = \cos\theta |\uparrow\rangle - \sin\theta |\leftrightarrow\rangle = |-\theta\rangle$, ce qui fait tourner la polarisation d'un angle 2θ , c'est-à-dire deux fois l'angle entre l'axe de la lame et la direction de la polarisation linéaire considérée. De même, l'action d'une lame quart d'onde ($\phi = \pi/2$) sur l'état $|\nearrow\rangle = (|\uparrow\rangle + |\leftrightarrow\rangle)/\sqrt{2}$ produit l'état $|\psi_{\text{out}}\rangle = (|\uparrow\rangle + i|\leftrightarrow\rangle)/\sqrt{2} = |+\rangle$, ce qui permet de produire un état de polarisation circulaire droite.

Considérons enfin l'effet du dispositif représenté Fig. 2.10 sur un état arbitraire $|\psi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\leftrightarrow\rangle$. D'après ce qui précède, juste après la lame quart d'onde l'état du système s'écrit $|\psi'\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + i\beta |\leftrightarrow\rangle$. C'est cet état que l'on mesure ensuite dans la base $\{|\nearrow\rangle, |\nwarrow\rangle\}$ à l'aide du prisme de Rochon tourné d'un angle $\pi/4$ par rapport à la verticale. D'après le postulat de la mesure, la probabilité de mesurer le photon sur le détecteur A s'écrit

$$\mathcal{P}_A = |\langle \nearrow | \psi' \rangle|^2 = \left| \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{-1}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} \alpha \\ i\beta \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{|\alpha - i\beta|^2}{2}. \quad (2.43)$$

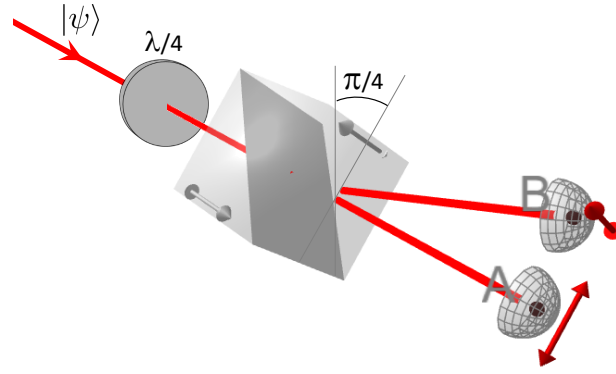


FIGURE 2.10 – *Mesure de l'état de polarisation dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ en combinant une lame $\lambda/4$ dont l'axe optique est vertical et un prisme de Rochon faisant un angle de $\pi/4$ par rapport à la verticale.*

On montrerait de même que $\mathcal{P}_B = |\alpha + i\beta|^2/2$. Or, si le système est préparé dans l'état $|\psi\rangle$, les probabilités de mesure dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ s'écrivent

$$\mathcal{P}_{\pm} = |\langle \pm | \psi \rangle|^2 = \left| \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \mp \frac{i}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{|\alpha \mp i\beta|^2}{2}. \quad (2.44)$$

On en déduit que $\mathcal{P}_A = \mathcal{P}_+$ et $\mathcal{P}_B = \mathcal{P}_-$. Ainsi, le dispositif représenté Fig. 2.10 réalise une mesure de polarisation dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ associée aux polarisations circulaire gauche et droite. En utilisant une lame à retard associée à un déphasage ϕ approprié, on pourrait de même concevoir un appareil de mesure permettant de mesurer l'état de polarisation dans une base orthonormée $\{|\chi\rangle, |\chi'\rangle\}$ arbitraire.

Chapitre 3

Principes fondamentaux

L'objet de ce chapitre est de formaliser les fondements de la physique quantique en étendant les principes introduits au chapitre précédent dans le cadre restreint mais instructif de l'état de polarisation d'un photon unique. La démarche inductive adoptée – tant ici que dans le chapitre précédent – ne saurait prétendre à une démonstration de ces postulats, par nature indémontrables. Elle se veut plutôt une illustration pédagogique des raisonnements qui ont conduit à leur élaboration. En revanche, la validité de ces postulats ne repose pas sur une simple construction théorique mais sur l'expérience, conformément à la démarche scientifique : à ce jour, aucune expérience n'a pu les invalider. De plus, l'application systématique de ces principes a engendré une multitude de prédictions théoriques, confrontées avec succès à l'expérience, souvent avec une précision absolument remarquable. Ainsi, le formalisme développé dans ce chapitre constitue un cadre théorique cohérent capable de décrire avec exactitude les propriétés d'un système quantique arbitraire.

3.1 Espace des états

L'espace des états que nous avons introduit au chapitre précédent était un espace vectoriel complexe de dimension 2, pouvant donc être engendré par une base orthonormée constituée de seulement deux vecteurs. Ces deux vecteurs étaient associés aux deux résultats possibles d'une mesure de polarisation. Dans le cas général, une mesure pourra évidemment avoir plus de deux résultats possibles, voire éventuellement une infinité ou même un continuum de résultats possibles (par exemple pour la mesure de la position d'une particule). Pour obtenir un postulat valable dans le cas général, il nous faut donc considérer des espaces vectoriels beaucoup plus vastes, de dimension pouvant éventuellement être infinie.

Principe 1 : Espace des états

A chaque système physique est associé un espace de Hilbert complexe approprié $\mathcal{E}_H$, l'état physique du système étant entièrement défini par un vecteur normé – appelé ket et noté $|\psi\rangle$ – appartenant à cet espace.

Un espace de Hilbert complexe est par définition un espace vectoriel sur le corps des complexes, muni d'un produit scalaire hermitien, et dans lequel toute suite de Cauchy converge. Le produit scalaire hermitien entre deux kets $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$ est noté ici $\langle\psi|\psi'\rangle$, et doit par définition obéir aux

propriétés énumérées ci-dessous.

Propriétés du produit scalaire hermitien

- Le produit scalaire hermitien est linéaire à droite, ce qui signifie que pour toute combinaison linéaire $|\psi'\rangle = \alpha |\psi_a\rangle + \beta |\psi_b\rangle$, on doit avoir

$$\langle \psi | \psi' \rangle = \alpha \langle \psi | \psi_a \rangle + \beta \langle \psi | \psi_b \rangle, \quad (3.1)$$

où α et β sont deux nombres complexes quelconques et $|\psi_a\rangle$ et $|\psi_b\rangle$ sont deux kets quelconques.

- Inverser l'ordre des deux termes d'un produit scalaire hermitien produit le complexe conjugué, soit

$$\langle \psi' | \psi \rangle = \langle \psi | \psi' \rangle^*. \quad (3.2)$$

- Pour tout ket $|\psi\rangle$, la grandeur $\langle \psi | \psi \rangle$ est un nombre réel positif ou nul, qui est nul si et seulement si $|\psi\rangle = 0$. On peut donc définir une norme selon l'expression

$$\| |\psi\rangle \| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (3.3)$$

Une conséquence des deux premières propriétés ci-dessus est que le produit scalaire hermitien est anti-linéaire à gauche. En effet, pour $|\psi'\rangle = \alpha |\psi_a\rangle + \beta |\psi_b\rangle$, on peut écrire

$$\langle \psi' | \psi \rangle = \langle \psi | \psi' \rangle^* = (\alpha \langle \psi | \psi_a \rangle + \beta \langle \psi | \psi_b \rangle)^* = \alpha^* \langle \psi_a | \psi \rangle + \beta^* \langle \psi_b | \psi \rangle. \quad (3.4)$$

On dit encore que le produit scalaire hermitien est une forme sesquilinéaire de $\mathcal{E}_H \times \mathcal{E}_H$ dans $\mathbb{C}$. On prendra garde au fait qu'en physique le produit scalaire hermitien est toujours défini comme étant linéaire à droite et anti-linéaire à gauche, contrairement à la convention inverse souvent utilisée en mathématiques.

Outre le fait qu'il est muni d'un produit scalaire hermitien, un espace de Hilbert doit être complet, ce qui signifie que toute suite de Cauchy converge. Cette notion de convergence va de soi dans un espace de dimension finie et n'est donc pertinente que dans les espaces de Hilbert de dimension infinie. Nous ne nous attarderons pas ici sur les subtilités mathématiques associés à cette notion de complétude : pour ce qui concerne ce cours de physique, il nous suffira d'admettre que les espaces de Hilbert rencontrés en physique quantique non relativiste admettent toujours au moins une base orthonormée dénombrable. On pourra donc toujours se représenter un ket de l'espace de Hilbert comme un vecteur colonne

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

où les c_n sont des coefficients complexes correspondant à la décomposition du ket $|\psi\rangle$ dans la base $\{|\psi_n\rangle\}$. Comme au chapitre précédent, cette notation pourra parfois correspondre au cas d'un espace

des états de dimension finie, notée ici N , ce qui correspond à l'expression

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} c_n |\psi_n\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Mais la notation utilisée pour écrire l'éq. 3.5 pourra aussi correspondre au cas d'un espace des états de dimension infinie, ce qui revient à considérer la limite

$$|\psi\rangle = \lim_{N \rightarrow +\infty} \sum_{n=0}^{N-1} c_n |\psi_n\rangle. \quad (3.7)$$

La série ci-dessus sera toujours supposée convergente puisqu'on a admis que l'ensemble dénombrable $\{|\psi_n\rangle\}$ constituait une base de l'espace des états.

Calculons le produit scalaire hermitien $\langle\psi_n|\psi\rangle$ entre un vecteur de base donné $|\psi_n\rangle$ et un ket quelconque $|\psi\rangle = \sum_{n'} c_{n'} |\psi_{n'}\rangle$. Le produit scalaire hermitien étant linéaire à droite, on pourra écrire

$$\langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_{n'} c_{n'} \langle\psi_n|\psi_{n'}\rangle. \quad (3.8)$$

La base étant orthonormée, on aura $\langle\psi_n|\psi_{n'}\rangle = \delta_{n,n'}$, où $\delta_{n,n'}$ est le symbole de Kronecker (prenant la valeur 1 si $n = n'$ et 0 si $n \neq n'$). Comme seul le terme où $n' = n$ subsiste dans la somme apparaissant dans l'éq. 3.8, on peut en déduire

$$c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle. \quad (3.9)$$

Exactement comme dans un espace euclidien, chaque coefficient de la décomposition d'un vecteur dans une base orthonormée peut donc être obtenu en calculant le produit scalaire avec le vecteur de base correspondant.

Considérons maintenant le produit scalaire entre deux kets quelconque $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$ et $|\psi'\rangle = \sum_{n'} c'_{n'} |\psi_{n'}\rangle$. Ce produit scalaire hermitien s'écrit

$$\langle\psi|\psi'\rangle = \sum_{n,n'} c_n^* c'_{n'} \langle\psi_n|\psi_{n'}\rangle = \sum_n c_n^* c'_n, \quad (3.10)$$

où l'on a utilisé d'une part le fait que le produit scalaire hermitien était anti-linéaire à gauche et linéaire à droite, et d'autre part le fait que la base $\{|\psi_n\rangle\}$ était une base orthonormée. On retrouve ainsi dans le cas général le produit scalaire hermitien que nous avons introduit au chapitre précédent dans le cas d'un espace des états de dimension 2.

Compte tenu des propriétés du produit matriciel, le produit scalaire hermitien exprimé par l'éq. 3.10 peut encore s'écrire comme le produit entre un vecteur ligne obtenu en transposant et en conjuguant le vecteur colonne apparaissant dans l'éq. 3.6 et d'un vecteur colonne correspondant au

ket $|\psi'\rangle$, ce qui donne

$$\langle\psi|\psi'\rangle = (c_0^*, c_1^*, c_2^*, \dots) \begin{pmatrix} c'_0 \\ c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_n c_n^* c'_n. \quad (3.11)$$

La notation proposée par Dirac, encore appelée *formalisme de Dirac* et déjà évoquée au chapitre précédent, consiste à appeler *bra* le vecteur ligne apparaissant dans l'équation ci-dessus. On pourra donc écrire le bra associé au ket donné par l'éq. 3.5 selon l'expression

$$\langle\psi| = (c_0^*, c_1^*, c_2^*, \dots). \quad (3.12)$$

On passe ainsi du ket au bra par une opération dite de transconjugaison (ou de conjugaison hermitienne), qui consiste à la fois à transposer et à conjuguer le vecteur colonne initial. Comme déjà évoqué au chapitre précédent, le produit d'un bra par un ket

$$\langle\psi| |\psi'\rangle = (c_0^*, c_1^*, c_2^*, \dots) \begin{pmatrix} c'_0 \\ c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_n c_n^* c'_n = \langle\psi|\psi'\rangle \quad (3.13)$$

nous donne directement le produit scalaire hermitien $\langle\psi|\psi'\rangle$ entre les deux vecteurs. La notation de Dirac est ainsi très pratique : il suffit de juxtaposer un bra et un ket puis de supprimer une des deux barres verticales pour obtenir le *bracket* $\langle\psi|\psi'\rangle$ correspondant au produit scalaire hermitien entre les kets $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$. D'un point de vue plus mathématique, on peut également considérer le bra comme un élément de l'espace dual $\mathcal{E}_H^*$, l'action du bra $\langle\psi|$ sur le ket $|\psi'\rangle$ correspondant au produit scalaire hermitien $\langle\psi|\psi'\rangle$.

Insistons sur le fait que, dans le formalisme de Dirac, l'espace délimité par le symbole correspondant au ket $|\rangle$ (ou au bra $\langle|$) doit rester inviolable, contrairement au symbole similaire $()$ utilisé en mathématiques pour décrire le produit scalaire hermitien. Ainsi, il ne faudra jamais remplacer la combinaison linéaire $\lambda|\psi\rangle + \mu|\psi'\rangle$ par $|\lambda\psi + \mu\psi'\rangle$, expression qui n'a aucun sens dans le cadre du formalisme de Dirac (de même qu'on n'écrira jamais $\lambda\vec{u} + \mu\vec{v} = \overrightarrow{\lambda u + \mu v}$ dans un espace euclidien).

3.2 Opérateurs linéaires agissant dans un espace de Hilbert

Avant de passer au second postulat, qui concernera comme au chapitre précédent la mesure d'une grandeur physique, il sera utile de considérer au préalable quelques propriétés des opérateurs linéaires agissant dans l'espace des états. Les 4 pages suivantes constituent ainsi une boîte à outils d'algèbre linéaire qu'il sera nécessaire de maîtriser pour pouvoir manipuler facilement le formalisme de Dirac en physique quantique.

3.2.1 Définition

Par définition, un opérateur linéaire $\hat{A}$ agissant sur une combinaison linéaire $\alpha|\psi_a\rangle + \beta|\psi_b\rangle$ de vecteurs de l'espace $\mathcal{E}_H$ doit donner une combinaison linéaire – avec les mêmes coefficients – de

l'action de $\hat{A}$ sur chacun des termes de la combinaison linéaire, soit

$$\hat{A}(\alpha|\psi_a\rangle + \beta|\psi_b\rangle) = \alpha\hat{A}|\psi_a\rangle + \beta\hat{A}|\psi_b\rangle. \quad (3.14)$$

L'existence d'une base dénombrable étant assurée, on peut associer une matrice (éventuellement infinie) à tout opérateur linéaire $\hat{A}$ agissant dans $\mathcal{E}_H$. Selon l'usage, les différentes colonnes de la matrice correspondent à l'action de $\hat{A}$ sur chacun des vecteurs de base $|\psi_n\rangle$. Un élément de matrice $A_{m,n}$ correspond donc à la composante numéro m du vecteur $\hat{A}|\psi_n\rangle$, soit

$$A_{m,n} = \langle\psi_m|(\hat{A}|\psi_n\rangle), \quad (3.15)$$

où l'on a utilisé l'éq. 3.9 pour écrire les composantes du vecteur $\hat{A}|\psi_n\rangle$ dans la base $\{|\psi_m\rangle\}$. L'expression ci-dessus peut s'interpréter comme le produit du bra $\langle\psi_m|$ (c'est-à-dire un vecteur ligne constitué de zéros sauf un 1 en position m), par le ket $\hat{A}|\psi_n\rangle$, lui-même égal au produit de la matrice associé à $\hat{A}$ par le vecteur colonne correspondant à $|\psi_n\rangle$, constitué de zéros sauf à la ligne numéro n où figure un 1. Compte tenu de l'associativité du produit matriciel, l'éq. 3.15 peut encore s'écrire sous la forme

$$A_{m,n} = \langle\psi_m|\hat{A}|\psi_n\rangle. \quad (3.16)$$

Dans cette expression, le produit $\langle\psi_m|\hat{A}|\psi_n\rangle$ peut s'interpréter comme le produit de trois termes : un vecteur ligne correspondant au bra $\langle\psi_m|$, une matrice carrée correspondant à $\hat{A}$, et un vecteur colonne correspondant au ket $|\psi_n\rangle$.

Sachant que la matrice associée à l'opérateur linéaire $\hat{A}$ est $A_{m,n}$, on peut encore écrire cet opérateur sous la forme

$$\hat{A} = \sum_{m,n} A_{m,n} |\psi_m\rangle \langle\psi_n|. \quad (3.17)$$

Cette expression est bien légitime puisque le produit d'un vecteur colonne $|\psi_m\rangle$ par un vecteur ligne $\langle\psi_n|$ donne une matrice carrée, que l'on peut effectivement associer à un opérateur linéaire. En l'occurrence l'opérateur $|\psi_m\rangle \langle\psi_n|$ correspond à une matrice ne comportant que des zéros, à l'exception de la m^e ligne et de la n^e colonne à l'intersection desquelles se trouve un 1. L'action de $\hat{A}$ sur un état $|\psi\rangle$ quelconque s'écrit alors

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{m,n} A_{m,n} |\psi_m\rangle \langle\psi_n|\psi\rangle. \quad (3.18)$$

En multipliant à gauche par le bra $\langle\psi_m|$, on obtient

$$\langle\psi_m|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_n A_{m,n} \langle\psi_n|\psi\rangle. \quad (3.19)$$

On reconnaît dans le membre de gauche l'expression des composantes du vecteur colonne associé à $\hat{A}|\psi\rangle$, écrit dans le membre de droite comme le produit matriciel de la matrice associée à $\hat{A}$ par le vecteur colonne associé à $|\psi\rangle$, en sommant sur l'indice intermédiaire n . En remplaçant $|\psi\rangle$ par $|\psi_n\rangle$, la somme se réduit à un seul terme en raison de l'orthogonalité de la base, et on retrouve bien entendu $\langle\psi_m|\hat{A}|\psi_n\rangle = A_{m,n}$.

Un exemple très utile d'opérateur linéaire est le projecteur $|\psi_m\rangle\langle\psi_m|$ sur le ket $|\psi_m\rangle$. On peut s'assurer qu'il s'agit bien d'un projecteur en vérifiant la propriété d'idempotence, qui s'écrit ici

$$(|\psi_m\rangle\langle\psi_m|)^2 = |\psi_m\rangle\langle\psi_m||\psi_m\rangle\langle\psi_m| = |\psi_m\rangle\langle\psi_m|\psi_m\rangle\langle\psi_m| = |\psi_m\rangle\langle\psi_m|. \quad (3.20)$$

Une façon plus explicite de reconnaître la nature de l'opérateur $|\psi_m\rangle\langle\psi_m|$ est de le faire agir sur un ket $|\psi\rangle$ quelconque décomposé dans la base $\{|\psi_n\rangle\}$ selon l'éq. 3.5. On obtient alors

$$|\psi_m\rangle\langle\psi_m||\psi\rangle = |\psi_m\rangle\langle\psi_m|\psi\rangle = c_m|\psi_m\rangle. \quad (3.21)$$

On obtient ainsi un ket colinéaire à $|\psi_m\rangle$ avec un coefficient multiplicatif c_m correspondant à la composante du ket $|\psi\rangle$ dans la base $\{|\psi_n\rangle\}$, résultat qui correspond bien à l'expression attendue pour la projection de $|\psi\rangle$ sur $|\psi_m\rangle$.

Un autre exemple d'opérateur linéaire est l'identité, notée $\hat{I}$ et définie par $\hat{I}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ pour tout $|\psi\rangle$. La matrice correspondante, associée aux éléments de matrice $\langle\psi_m|\hat{I}|\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{m,n}$, est une matrice diagonale constituée de 1 sur la diagonale. En utilisant l'éq. 3.17 pour écrire l'opérateur identité, on obtient alors

$$\hat{I} = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|. \quad (3.22)$$

Cette expression très utile est connue sous le nom de *relation de fermeture*. Elle permet d'écrire l'identité comme la somme des projecteurs $|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ sur les différents vecteurs d'une base orthonormée.

3.2.2 Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur linéaire

Par définition, un nombre complexe a est appelé valeur propre de l'opérateur linéaire $\hat{A}$ s'il existe au moins un vecteur $|\psi\rangle$ non nul tel que

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle. \quad (3.23)$$

Le ket $|\psi\rangle$ est alors appelé vecteur propre de $\hat{A}$ pour la valeur propre a . Toute combinaison linéaire de deux vecteurs propres associés à une valeur propre donnée a étant également vecteur propre pour cette même valeur propre, l'ensemble des vecteurs propres de $\hat{A}$ pour une valeur propre donnée a constitue un sous-espace vectoriel de $\mathcal{E}_H$ que l'on appellera le sous-espace propre de $\hat{A}$ pour la valeur propre a . La dimension de ce sous-espace est par définition la *dégénérescence* de la valeur propre a . On dira que la valeur propre a est non dégénérée si le sous-espace propre qui lui est associé est de dimension 1, ce qui signifie que l'on peut associer un vecteur propre unique à cette valeur propre (à un facteur multiplicatif près). Enfin, on appellera *spectre* de $\hat{A}$ et on notera $\text{Sp}\hat{A}$ l'ensemble des valeurs propres d'un opérateur linéaire $\hat{A}$.

A titre d'exemple, tout ket de $\mathcal{E}_H$ est vecteur propre de $\hat{I}$ pour la valeur propre 1. On a donc $\text{Sp}\hat{I} = \{1\}$. De même, on a $\text{Sp}|\psi_m\rangle\langle\psi_m| = \{0, 1\}$. La valeur propre 1 est non dégénérée, le sous-espace propre associé à cette valeur propre étant engendré par le ket $|\psi_m\rangle$. Le sous-espace supplémentaire, constitué des vecteurs orthogonaux à $|\psi_m\rangle$, est quant à lui le sous-espace propre associé à la valeur propre 0. Cette dernière sera donc dégénérée dès lors que la dimension de $\mathcal{E}_H$ est strictement

supérieure à 2.

Dans un espace de Hilbert de dimension finie N , on pourra rechercher les valeurs propres d'un opérateur $\hat{A}$ en écrivant l'éq. 3.23 sous la forme $(\hat{A} - a\hat{I})|\psi\rangle = 0$, qui n'admet de solution non triviale que si le déterminant de la matrice associée à $\hat{A} - a\hat{I}$ est nul. On obtient ainsi une équation de degré N en a , qui admettra N racines – dont certaines pourront être des racines multiples en cas de dégénérescence.

3.2.3 Adjoint d'un opérateur

On appelle *adjoint* d'un opérateur linéaire $\hat{A}$ l'opérateur noté $\hat{A}^\dagger$ défini par le fait que le bra associé au ket $\hat{A}|\psi\rangle$ est $\langle\psi|\hat{A}^\dagger$. En d'autres termes, pour deux kets $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$ quelconques, on a

$$\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\psi'\rangle = \left(\langle\psi'|\hat{A}|\psi\rangle\right)^*. \quad (3.24)$$

En appliquant cette équation à deux vecteurs de base, on en déduit

$$\langle\psi_m|\hat{A}^\dagger|\psi_n\rangle = \left(\langle\psi_n|\hat{A}|\psi_m\rangle\right)^*. \quad (3.25)$$

Pour passer de la matrice de $\hat{A}$ à celle de $\hat{A}^\dagger$, il suffit donc de transposer la matrice puis de prendre le complexe conjugué. On retrouve l'opération de transconjugaison, ou de conjugaison hermitienne, déjà évoquée plus haut pour passer du ket au bra. La seule différence est que la conjugaison hermitienne d'une matrice donne à nouveau une matrice, alors que la conjugaison hermitienne d'un ket (resp. bra) donne un autre objet mathématique, à savoir un bra (resp. ket).

3.2.4 Opérateurs hermitiens

Par définition, un opérateur hermitien (ou opérateur auto-adjoint) est égal à son propre adjoint, soit $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. D'après l'éq. 3.24, un opérateur $\hat{A}$ est hermitien si et seulement si $\langle\psi|\hat{A}|\psi'\rangle = \langle\psi'|\hat{A}|\psi\rangle^*$ pour tous kets $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$. En appliquant cette relation aux vecteurs de base, on en déduit que la matrice d'un opérateur hermitien est sa propre transconjugée. À l'aide de l'éq. 3.17, il est facile de montrer qu'il s'agit là d'une condition nécessaire et suffisante pour qu'un opérateur soit hermitien. La matrice le représentant pourra par exemple être une matrice symétrique réelle, ou plus généralement une matrice complexe à condition que les éléments de matrice situés symétriquement de part et d'autre de la diagonale soient complexes conjugués l'un de l'autre.

Le fait qu'un opérateur soit hermitien aura des conséquences importantes sur ses vecteurs propres et sur ses valeurs propres. En effet, en multipliant l'éq. 3.23 par le bra $\langle\psi|$, et en supposant que $|\psi\rangle$ est normé, on en déduit la relation $a = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$. En prenant le complexe conjugué, on obtient $a^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle$. Dans le cas d'un opérateur hermitien, on en déduit que $a = a^*$, et donc que a est un nombre réel. Le spectre de valeurs propres d'un opérateur hermitien est donc inclus dans l'ensemble des nombres réels, soit $\text{Sp}\hat{A} \subset \mathbb{R}$. Par ailleurs, si on considère deux vecteurs propres $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$ associés aux valeurs propres respectives a et a' , on peut écrire

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi'\rangle = \langle\psi|a'|\psi'\rangle = \langle\psi|a|\psi'\rangle, \quad (3.26)$$

où l'on a fait agir $\hat{A}$ successivement à droite sur $|\psi'\rangle$ puis à gauche sur $\langle\psi|$, en utilisant dans ce dernier cas le fait que, pour un opérateur hermitien, le conjugué hermitien de l'éq. 3.23 s'écrit $\langle\psi|\hat{A} = \langle\psi|a$. On obtient ainsi

$$(a - a') \langle\psi|\psi'\rangle = 0. \quad (3.27)$$

On en déduit que soit les valeurs propres sont identiques, soit les vecteurs propres sont orthogonaux. Ainsi, deux vecteurs propres associées à différentes valeurs propres d'un opérateur hermitien sont nécessairement orthogonaux. De fait, on peut montrer que, dans un espace de Hilbert de dimension finie, il est toujours possible de construire une base orthonormée de $\mathcal{E}_H$ constituée de l'ensemble des vecteurs propres de tout opérateur hermitien $\hat{A}$. Ce théorème, appelé *théorème spectral*, pourra même être étendu au cas des espaces de Hilbert de dimension infinie, au moins pour les espaces de Hilbert que nous rencontrerons dans ce cours et dans le cas où le spectre de l'opérateur hermitien considéré est dénombrable⁽ⁱ⁾.

Théorème spectral

Tout opérateur hermitien $\hat{A}$ dont le spectre est discret (*i.e.* dénombrable) est diagonalisable, ce qui signifie que l'on peut construire une base orthonormée $\{|\psi_n\rangle\}$ de l'espace de Hilbert constituée des vecteurs propres de $\hat{A}$. On pourra ainsi écrire

$$\hat{A} = \sum_n a_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n|, \quad (3.28)$$

où les nombres réels a_n sont les valeurs propres de $\hat{A}$. Cela revient à écrire $\hat{A}$ sous forme d'une matrice diagonale dans la base $\{|\psi_n\rangle\}$, soit

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_0 & 0 & 0 & & \\ 0 & a_1 & 0 & & \\ 0 & 0 & a_2 & & \\ & & & \ddots & \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

Dans le cas où une valeur propre est dégénérée, la formulation ci-dessus suppose bien entendu que cette valeur propre est répétée autant de fois que nécessaire. Par exemple, si la valeur propre a_0 est dégénérée deux fois, on posera $a_1 = a_0$ et on construira une base $\{|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle\}$ du sous-espace propre associé à cette valeur propre.

3.2.5 Fonction d'un opérateur

Etant donné une fonction complexe $f(a)$ d'un nombre complexe a , on peut définir la fonction d'un opérateur $\hat{A}$ de deux manières différentes. La première approche peut être utilisée si l'opérateur $\hat{A}$ est diagonalisable dans une base dénombrable $\{|\psi_n\rangle\}$, soit

$$\hat{A} = \sum_n a_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n|. \quad (3.30)$$

⁽ⁱ⁾Nous verrons au chapitre 4 que l'on peut étendre le théorème spectral au cas d'un spectre continu, à condition d'accepter que les vecteurs de base n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert.

La fonction d'opérateur $f(\hat{A})$ est alors simplement définie par la relation

$$f(\hat{A}) = \sum_n f(a_n) |\psi_n\rangle \langle \psi_n|, \quad (3.31)$$

ce qui revient à dire que $f(\hat{A}) |\psi_n\rangle = f(a_n) |\psi_n\rangle$. La seconde approche peut être utilisée si la fonction $f(a)$ peut être décomposée en séries entières selon l'expression

$$f(a) = \sum_{k=0}^{+\infty} f^{(k)} a^k. \quad (3.32)$$

On pourra alors écrire

$$f(\hat{A}) = \sum_{k=0}^{+\infty} f^{(k)} \hat{A}^k, \quad (3.33)$$

avec évidemment $\hat{A}^k |\psi\rangle = \hat{A} \cdots \hat{A} |\psi\rangle$. On aura par exemple

$$e^{\hat{A}} = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{\hat{A}^k}{k!}. \quad (3.34)$$

3.3 Mesure

3.3.1 Mesure de l'état du système

Passons maintenant au problème de la mesure en physique quantique, en généralisant l'approche discutée au chapitre précédent. Rappelons que, dans le cas de la polarisation du photon, nous avons introduit la mesure en considérant les deux sorties possibles d'un polariseur à deux voies. Cela revient à mesurer l'état du système en se donnant une base de mesure orthonormée, par exemple $\{|\uparrow\rangle, |\leftrightarrow\rangle\}$, $\{|\alpha\rangle, |\alpha + \pi/2\rangle\}$, ou encore $\{|+\rangle, |-\rangle\}$. Pour généraliser cette approche au cas d'un espace des états de dimension N , où N est éventuellement infini, donnons-nous de même une base de mesure orthonormée $\{|\psi_n\rangle\}$ constituée de N vecteurs. La mesure associée à cette base pourra être décrite selon le schéma représenté Fig. 3.1, qui constitue une sorte de polariseur à N voies.



FIGURE 3.1 – Appareil de mesure permettant de mesurer l'état du système dans une base de mesure $\{|\psi_n\rangle\}$.

En nous laissant guider par le principe introduit en 2.3.2, nous pouvons proposer une ébauche de principe de la mesure constitué des trois points suivants :

- Une mesure aura pour résultat l'un des états $|\psi_n\rangle$ de la base de mesure.
- La probabilité d'obtenir le résultat $|\psi_n\rangle$ s'écrit $\mathcal{P}_n = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$, où $|\psi\rangle$ est l'état du système avant la mesure.

- L'état du système après la mesure est l'état $|\psi_n\rangle$ effectivement mesuré.

3.3.2 Mesure d'une grandeur physique dans le cas non dégénéré

La formulation du postulat de la mesure exposée ci-dessus est *a priori* tout à fait satisfaisante. Toutefois, l'usage est plutôt de considérer que le résultat d'une mesure est un nombre réel associé à ce qu'on appelle une grandeur physique. On peut parfaitement adapter notre principe à ce point de vue en associant un nombre réel a_n à chaque ket $|\psi_n\rangle$ de la base de mesure. Dans un premier temps nous allons supposer pour simplifier que les nombres a_n sont tous différents, de sorte que la relation entre un nombre a_n et le vecteur $|\psi_n\rangle$ est biunivoque. On aboutit ainsi au schéma représenté Fig. 3.2, où notre appareil mesure une grandeur physique appelée A pouvant donner comme résultat l'une des valeurs a_n définies plus haut. On voit ainsi apparaître un aspect important des mesures quantiques, à savoir que le résultat de la mesure ne peut donner que certaines valeurs prédéterminées, ici les nombres a_n , le nombre de résultats possibles ne pouvant excéder la dimension N de l'espace.

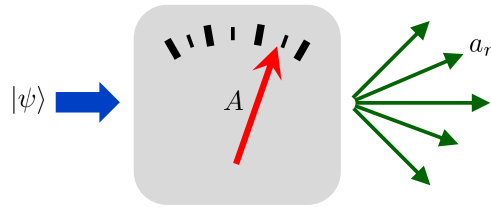


FIGURE 3.2 – Appareil de mesure permettant de mesurer une grandeur physique A , symbolisée ici par la position d'une aiguille sur un cadran, le résultat pouvant prendre l'une des valeurs a_n .

En nous appuyant sur le principe de la mesure proposé en 3.3.1, calculons la valeur moyenne, notée $\langle A \rangle$, de la grandeur physique A . On obtient

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n \mathcal{P}_n = \sum_n a_n |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2. \quad (3.35)$$

En remplaçant $|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$ par $\langle \psi | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle$, on obtient

$$\langle A \rangle = \sum_n \langle \psi | \psi_n \rangle a_n \langle \psi_n | \psi \rangle = \langle \psi | \left(\sum_n a_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \right) | \psi \rangle. \quad (3.36)$$

On a ainsi fait apparaître l'opérateur linéaire

$$\hat{A} = \sum_n a_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|, \quad (3.37)$$

tel que la valeur moyenne de A lorsque le système est dans l'état $|\psi\rangle$ s'écrive simplement

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (3.38)$$

Remarquons que l'opérateur $\hat{A}$ est un opérateur hermitien, puisque selon l'éq. 3.37 il est représenté par une matrice symétrique réelle dans la base de mesure. La matrice étant en outre diagonale, on peut remarquer que les nombres a_n sont en fait les valeurs propres de $\hat{A}$, associées aux vecteurs

propres $|\psi_n\rangle$, soit

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle. \quad (3.39)$$

Dans ce qui précède, nous avons construit l'opérateur hermitien $\hat{A}$ en partant de la base de mesure $\{|\psi_n\rangle\}$ et des valeurs a_n . Mais on peut tout à fait procéder en sens inverse, en prenant comme point de départ un opérateur hermitien $\hat{A}$ associé à la grandeur physique considérée A . L'opérateur $\hat{A}$ étant hermitien, on sait d'après le théorème spectral qu'il est diagonalisable et qu'on peut donc construire une base dénombrable $\{|\psi_n\rangle\}$ à l'aide des vecteurs propres de $\hat{A}$ (au moins dans le cas où le spectre de $\hat{A}$ est discret). Cette nouvelle approche nous permet de reformuler de manière équivalente le postulat de la mesure, mais en prenant cette fois la grandeur physique A comme point de départ.

Principe 2 : Mesure (cas non dégénéré)

- (i) À toute grandeur physique A on associe un opérateur linéaire hermitien $\hat{A}$ appelé *observable* et agissant dans l'espace des états.
- (ii) Une mesure de la grandeur physique A ne peut donner comme résultat que l'une des valeurs propres a_n de l'observable $\hat{A}$. *On suppose ici que le spectre de $\hat{A}$ est discret et non dégénéré.*
- (iii) Pour un système se trouvant dans l'état $|\psi\rangle$ juste avant la mesure, la probabilité de mesurer la valeur a_n s'écrit

$$\mathcal{P}(a_n) = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2, \quad (3.40)$$

où $|\psi_n\rangle$ est le vecteur propre associé à la valeur propre a_n .

- (iv) Si la mesure de A donne le résultat a_n , alors juste après la mesure le système est dans l'état $|\psi_n\rangle$.

Le point (i) du principe de la mesure permet notamment d'affirmer que $\hat{A}$ est diagonalisable et que toute valeur propre a de l'observable $\hat{A}$ est bien réelle (et donc, d'après (ii), qu'il en va de même pour tout résultat de mesure). En effet, pour un vecteur propre $|\psi\rangle$ associé à la valeur propre a , on peut écrire

$$a = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = (\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle)^* = (\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle)^* = a^*. \quad (3.41)$$

En partant de cette nouvelle formulation du principe de la mesure, on peut bien entendu refaire le raisonnement effectué plus haut et vérifier que la relation $\langle A \rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ reste valable.

3.3.3 Mesure d'une grandeur physique dans le cas dégénéré

Nous avons fait jusqu'ici l'hypothèse simplificatrice d'une grandeur physique associée à une observable dont le spectre était non dégénéré, ce qui résultait en une correspondance biunivoque entre un résultat de mesure a_n et le vecteur propre unique $|\psi_n\rangle$ qui lui était associé. Néanmoins, on peut rencontrer des observables dont les valeurs propres sont dégénérées, ce qui rend plus délicate la formulation du postulat de la mesure. Considérons ainsi une grandeur physique A associée à l'observable $\hat{A}$ dont le spectre, toujours supposé dénombrable, contient des valeurs propres pouvant être

dégénérées. Pour une valeur propre a_n dégénérée, on ne peut plus associer un vecteur propre unique. On peut néanmoins construire une base propre orthonormée $\{|\psi_{n,r}\rangle\}$ du sous-espace propre associé à la valeur propre a_n , où l'indice r peut prendre g_n valeurs différentes, g_n étant la dégénérescence de la valeur propre a_n . L'ensemble des vecteurs propres $\{|\psi_{n,r}\rangle\}$ (pour toutes les valeurs possibles de n et r) constituant une base orthonormée de l'espace de Hilbert, tout état $|\psi\rangle$ pourra s'écrire

$$|\psi\rangle = \sum_{n,r} c_{n,r} |\psi_{n,r}\rangle, \quad (3.42)$$

où $c_{n,r} = \langle \psi_{n,r} | \psi \rangle$. La matrice de l'observable $\hat{A}$ étant diagonale dans la base $\{|\psi_{n,r}\rangle\}$, on peut écrire

$$\hat{A} = \sum_{n,r} a_n |\psi_{n,r}\rangle \langle \psi_{n,r}|, \quad (3.43)$$

ou encore

$$\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n, \quad (3.44)$$

où

$$\hat{P}_n = \sum_r |\psi_{n,r}\rangle \langle \psi_{n,r}| \quad (3.45)$$

est le projecteur sur l'espace propre associé à la valeur propre a_n . Remarquons que l'opérateur $\hat{P}_n$ est bien un projecteur car

$$\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n \hat{P}_n = \sum_{r,r'} |\psi_{n,r}\rangle \langle \psi_{n,r} | \psi_{n,r'} \rangle \langle \psi_{n,r'}| = \sum_r |\psi_{n,r}\rangle \langle \psi_{n,r}| = \hat{P}_n, \quad (3.46)$$

où nous avons utilisé le fait que $\langle \psi_{n,r} | \psi_{n,r'} \rangle = 0$ pour $r \neq r'$. Avec ces notations, la relation de fermeture (éq. 3.22) devient

$$\hat{I} = \sum_{n,r} |\psi_{n,r}\rangle \langle \psi_{n,r}| = \sum_n \sum_r |\psi_{n,r}\rangle \langle \psi_{n,r}| = \sum_n \hat{P}_n. \quad (3.47)$$

Pour déterminer la probabilité qu'une mesure de A donne le résultat a_n , on peut s'appuyer sur une mesure plus complète, consistant à mesurer complètement l'état du système dans la base de mesure $\{|\psi_{n,r}\rangle\}$. Une telle mesure permet en outre de déterminer la grandeur A puisqu'on sait que cette dernière prend la valeur a_n à chaque fois que l'on a obtenu le résultat $|\psi_{n,r}\rangle$, quelle que soit la valeur de r . La probabilité de mesurer a_n peut donc s'écrire comme la somme des probabilités de mesurer l'état $|\psi_{n,r}\rangle$, en sommant sur toutes les valeurs possibles de r . On obtient ainsi

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_r |\langle \psi_{n,r} | \psi \rangle|^2 = \sum_r \langle \psi | \psi_{n,r} \rangle \langle \psi_{n,r} | \psi \rangle. \quad (3.48)$$

En faisant sortir de la somme sur r le bra $\langle \psi |$ et le ket $|\psi\rangle$, on obtient

$$\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi | \left(\sum_r |\psi_{n,r}\rangle \langle \psi_{n,r}| \right) | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle. \quad (3.49)$$

Sachant que $\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$ d'après l'éq. 3.46 (car $\hat{P}_n$ est un projecteur), on peut encore écrire

$$\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_n^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_n \hat{P}_n | \psi \rangle = \|\hat{P}_n | \psi \rangle\|^2. \quad (3.50)$$

La probabilité de mesurer a_n peut donc encore s'écrire comme le carré de la norme de la projection de l'état du système dans l'espace propre associé à la valeur propre mesurée. Enfin, concernant l'état du système après la mesure lorsqu'on a obtenu le résultat a_n , nous allons imposer – comme dans le cas non dégénéré – qu'il appartienne à l'espace propre associé. Nous verrons en 3.3.4 que cette condition permettra notamment de satisfaire l'exigence de répétabilité de la mesure. L'hypothèse la plus simple consiste à se contenter d'annuler dans l'éq. 3.42 tous les coefficients qui doivent disparaître ($\{c_{n',r}$ pour $n' \neq n\}$) tout en laissant inchangés les coefficients que l'on peut conserver ($\{c_{n,r}\}$). Le fait de ne pas modifier ces dernières composantes du vecteur d'état peut s'interpréter comme la définition d'un appareil de mesure idéal, qui modifie le moins possible l'état du système. On aura reconnu dans cette opération la projection de l'état initial dans l'espace propre associé à la valeur propre effectivement mesurée. Il faudra toutefois normaliser l'état ainsi obtenu, ce qui nous amène à postuler que l'état du système après la mesure s'écrit $\hat{P}_n | \psi \rangle / \|\hat{P}_n | \psi \rangle\|$. Remarquons que le dénominateur de cette dernière expression est bien non nul puisque son carré est la probabilité de mesurer a_n , évidemment non nulle compte tenu de l'issue effective de la mesure. Le postulat de la mesure peut finalement être généralisé comme ci-dessous.

Principe 2 : Mesure (cas général)

- (i) À toute grandeur physique A on associe un opérateur linéaire hermitien $\hat{A}$ appelé *observable* et agissant dans l'espace des états.
- (ii) Une mesure de la grandeur physique A ne peut donner comme résultat que l'une des valeurs propres a_n de l'observable $\hat{A}$. *On suppose ici que le spectre de $\hat{A}$ est discret.*
- (iii) Pour un système se trouvant dans l'état $|\psi\rangle$ juste avant la mesure, la probabilité de mesurer la valeur a_n s'écrit

$$\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle = \|\hat{P}_n | \psi \rangle\|^2, \quad (3.51)$$

où $\hat{P}_n$ est le projecteur sur le sous-espace propre associé à la valeur propre a_n .

- (iv) Si la mesure de A donne le résultat a_n , alors juste après la mesure le système est dans l'état

$$|\psi'\rangle = \frac{\hat{P}_n | \psi \rangle}{\|\hat{P}_n | \psi \rangle\|}. \quad (3.52)$$

On peut vérifier que cette formulation plus générale permet bien de retrouver le principe énoncé en 3.3.2 dans le cas particulier où les valeurs propres de $\hat{A}$ étaient non dégénérées. Dans ce cas, on peut associer un vecteur propre unique $|\psi_n\rangle$ à chaque valeur propre, de sorte que le projecteur $\hat{P}_n$ s'écrit simplement $\hat{P}_n = |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$. L'éq. 3.51 devient alors

$$\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle = \langle \psi | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2 \quad (3.53)$$

ce qui nous redonne bien l'éq. 3.40. Par ailleurs, l'état du système après la mesure s'écrit

$$\frac{\hat{P}_n |\psi\rangle}{\|\hat{P}_n |\psi\rangle\|} = \frac{|\psi_n\rangle \langle\psi_n| |\psi\rangle}{\| |\psi_n\rangle \langle\psi_n| |\psi\rangle \|} = \frac{\langle\psi_n|\psi\rangle}{|\langle\psi_n|\psi\rangle|} |\psi_n\rangle, \quad (3.54)$$

ce qui nous redonne bien le ket $|\psi_n\rangle$ comme postulé en 3.3.2, à une phase globale près qui est sans importance puisque, selon l'éq. 3.51, un facteur de phase global sur l'état du système n'a pas de conséquence sur les probabilités de mesure.

En pratique, lorsqu'on s'intéresse à un résultat de mesure a_n , la méthode la plus efficace consiste à calculer directement l'action du projecteur $\hat{P}_n$ sur l'état $|\psi\rangle$ du système, soit $\hat{P}_n |\psi\rangle$. Le carré de la norme de ce vecteur donne alors la probabilité d'obtenir ce résultat de mesure, tandis que le vecteur projeté normalisé donne l'état du système après la mesure.

Dans le cas où le spectre de l'observable $\hat{A}$ est continu on ne peut plus parler de probabilité de mesurer la valeur a puisque, pour une précision arbitrairement bonne, la valeur effectivement mesurée ne tombera jamais exactement sur la valeur choisie. La seule question qui ait un sens est alors de savoir si la valeur mesurée est comprise dans un intervalle donné $[a - \delta a/2, a + \delta a/2]$, où δa représente la précision de l'appareil de mesure utilisé. En pratique, une mesure donnera toujours accès à une version *échantillonnée* de la grandeur physique continue et on pourra donc toujours se ramener à l'hypothèse formulée plus haut d'un spectre discret. Il est néanmoins possible de définir une densité de probabilité $p(a)$ associée à la grandeur physique A à l'aide de la relation

$$p(a) = \lim_{\delta a \rightarrow 0} \frac{\mathcal{P}([a - \delta a/2, a + \delta a/2])}{\delta a}, \quad (3.55)$$

où $\mathcal{P}([a - \delta a/2, a + \delta a/2])$ est la probabilité que la mesure de A donne un résultat appartenant à l'intervalle spécifié. Nous reviendrons sur cette question au chapitre 4.

3.3.4 Valeur moyenne d'une grandeur physique

Calculons pour vérifier la valeur moyenne $\langle A \rangle$ à l'aide du point (iii) du postulat de la mesure énoncé plus haut. On obtient

$$\langle A \rangle = \sum_n \mathcal{P}(a_n) a_n = \sum_n a_n \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle = \langle \psi | \left(\sum_n a_n \hat{P}_n \right) | \psi \rangle, \quad (3.56)$$

ce qui, à l'aide de l'éq. 3.44, nous redonne bien le résultat attendu $\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$.

L'expression $\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ permet de calculer non seulement la valeur moyenne d'une grandeur physique A mais aussi de toute fonction de A . On aura par exemple $\langle A^2 \rangle = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle$, relation permettant de calculer la variance ΔA^2 de la grandeur A selon l'expression

$$\Delta A^2 = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2. \quad (3.57)$$

Rappelons que la variance peut encore se mettre sous la forme

$$\Delta A^2 = \langle \psi | \left(\hat{A} - \langle A \rangle \right)^2 | \psi \rangle, \quad (3.58)$$

expression que l'on peut vérifier immédiatement en développant le carré et en utilisant la relation $\langle \langle A \rangle A \rangle = \langle A \rangle^2$. La formulation de la variance selon l'éq. 3.58 permet d'en donner une interprétation très claire : la variance correspond simplement à la moyenne du carré de l'écart à la valeur moyenne. Elle caractérise donc ce qu'on appelle la *dispersion* de la grandeur A , c'est-à-dire à quel point les mesures individuelles effectuées sur le système peuvent s'écarter de la valeur moyenne $\langle A \rangle$. Pour caractériser cette dispersion, on utilise plus souvent l'écart type $\Delta A = \sqrt{\Delta A^2}$, encore appelé écart quadratique moyen, qui a la même dimension que la grandeur considérée.

Considérons maintenant un cas particulier important, celui où la mesure donne un résultat certain, totalement dénué d'incertitude. Cela veut dire que si on répète la mesure de A sur un système préparé à chaque fois dans l'état $|\psi\rangle$, on est certain de toujours trouver le résultat a . On a alors évidemment $\langle A \rangle = a$ mais aussi $\langle A^2 \rangle = a^2$, ce qui signifie que la variance ΔA^2 est nulle. Que peut-on en déduire sur l'état $|\psi\rangle$ du système ? Pour répondre à cette question, reformulons l'expression de la variance

$$\Delta A^2 = \langle \psi | (\hat{A} - a)^2 | \psi \rangle \quad (3.59)$$

$$= \langle \psi | (\hat{A} - a) (\hat{A} - a) | \psi \rangle. \quad (3.60)$$

L'opérateur $\hat{A} - \langle A \rangle \hat{I}$ étant un opérateur hermitien, on peut en déduire

$$\Delta A^2 = \left\| (\hat{A} - a) |\psi\rangle \right\|^2. \quad (3.61)$$

En conséquence, ΔA est nul si et seulement si $(\hat{A} - a) |\psi\rangle = 0$, soit $\hat{A} |\psi\rangle = a |\psi\rangle$. On peut en conclure qu'une condition nécessaire et suffisante pour que le résultat d'une mesure soit certain ($\Delta A = 0$) est que l'état $|\psi\rangle$ du système soit un état propre de l'observable $\hat{A}$. Ce résultat apporte un éclairage intéressant sur le point (iv) du postulat de la mesure. En effet, le fait que l'état du système à l'issue de la mesure soit un état propre associé à la valeur propre que l'on vient de mesurer garantit la répétabilité de la mesure : une seconde mesure effectuée immédiatement après, avant que l'état du système n'ait eu le temps d'évoluer, nous redonnera avec certitude le même résultat.

3.4 Evolution temporelle

Jusqu'ici, nous nous sommes intéressés à l'état du système à un instant donné, état que nous avons décrit à l'aide d'un ket normé $|\psi\rangle$ appartenant à un espace de Hilbert. Nous allons maintenant considérer l'évolution au cours du temps de cet état, que nous décrirons donc comme un ket normé $|\psi(t)\rangle$ dépendant du temps t .

3.4.1 Opérateur d'évolution

En l'absence de mesures, on supposera que l'état du système évolue de manière parfaitement déterministe. Le fait que $|\psi(t)\rangle$ soit déterminé de manière unique à partir de l'état initial $|\psi(t_0)\rangle$ nous autorise à introduire un opérateur, noté $\hat{U}(t, t_0)$ et appelé *opérateur d'évolution*, défini par la relation

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (3.62)$$

On a évidemment la relation triviale

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}. \quad (3.63)$$

Il est possible de composer l'action de deux opérateurs d'évolution en considérant le produit $\hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)$ qui exprime l'évolution du système d'abord de l'instant t_0 jusqu'à l'instant t_1 puis de l'instant t_1 jusqu'à l'instant t_2 . En faisant agir ce produit sur un état initial $|\psi(t_0)\rangle$ quelconque on obtient

$$\hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \hat{U}(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle = |\psi(t_2)\rangle. \quad (3.64)$$

Comme $|\psi(t_2)\rangle$ peut encore s'écrire $\hat{U}(t_2, t_0)|\psi(t_0)\rangle$, on en déduit que $\hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \hat{U}(t_2, t_0)|\psi(t_0)\rangle$. Cette relation étant valable pour tout état initial $|\psi(t_0)\rangle$, on en déduit la relation de composition

$$\hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t_2, t_0). \quad (3.65)$$

En vertu du principe de superposition linéaire, on pourra supposer en outre que l'opérateur d'évolution est un opérateur linéaire. Ainsi, si d'une part $|\psi_a(t_0)\rangle$ évolue vers $|\psi_a(t)\rangle$ et d'autre part $|\psi_b(t_0)\rangle$ évolue vers $|\psi_b(t)\rangle$, alors la combinaison linéaire $\alpha|\psi_a(t_0)\rangle + \beta|\psi_b(t_0)\rangle$ évoluera vers

$$\hat{U}(t, t_0)(\alpha|\psi_a(t_0)\rangle + \beta|\psi_b(t_0)\rangle) = \alpha\hat{U}(t, t_0)|\psi_a(t_0)\rangle + \beta\hat{U}(t, t_0)|\psi_b(t_0)\rangle \quad (3.66)$$

$$= \alpha|\psi_a(t)\rangle + \beta|\psi_b(t)\rangle. \quad (3.67)$$

Par ailleurs, l'opérateur d'évolution doit conserver la norme de notre état puisque d'après le premier postulat on doit avoir à tout instant $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$. Comme le montre l'annexe A.1, la conservation de la norme implique la conservation du produit scalaire hermitien, ce qui impose la relation

$$\hat{U}(t, t_0)^\dagger \hat{U}(t, t_0) = \hat{I}. \quad (3.68)$$

3.4.2 Hamiltonien

Considérons l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t + dt, t)$ correspondant à une évolution infinitésimale entre l'instant t et l'instant $t + dt$. Au premier ordre en dt , on peut écrire

$$\hat{U}(t + dt, t) = \hat{U}(t, t) + \frac{\partial \hat{U}(t', t)}{\partial t'}[t' = t] dt = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) dt \quad (3.69)$$

où nous avons introduit l'opérateur linéaire $\hat{H}(t)$ défini par la relation

$$\hat{H}(t) = i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t', t)}{\partial t'}[t' = t]. \quad (3.70)$$

En écrivant le conjugué hermitien de l'éq. 3.69, on obtient

$$\hat{U}(t + dt, t)^\dagger = \hat{I} + \frac{i}{\hbar} \hat{H}^\dagger(t) dt. \quad (3.71)$$

Enfin, en multipliant à droite cette dernière équation par l'éq. 3.69, on obtient au premier ordre en dt la relation

$$\hat{U}(t + dt, t)^\dagger \hat{U}(t + dt, t) = \hat{I} + \frac{i}{\hbar} \left(\hat{H}^\dagger(t) - \hat{H}(t) \right) dt. \quad (3.72)$$

Sachant, d'après l'éq. 3.68, que l'expression ci-dessus doit être égale à l'identité, on en déduit que $\hat{H}^\dagger(t) - H(t) = 0$. L'opérateur linéaire $\hat{H}(t)$ est donc un opérateur hermitien.

À l'aide de la relation de composition on peut enfin écrire

$$\hat{U}(t + dt, t_0) = \hat{U}(t + dt, t) \hat{U}(t, t_0) = \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) dt \right) \hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0) - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) dt. \quad (3.73)$$

On en déduit

$$\frac{\hat{U}(t + dt, t_0) - \hat{U}(t, t_0)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0). \quad (3.74)$$

L'opérateur d'évolution obéit donc à l'équation différentielle du premier ordre

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) \quad (3.75)$$

reliant son évolution temporelle à l'opérateur hermitien $\hat{H}(t)$. Ce résultat nous permet d'écrire l'équation gouvernant l'évolution de l'état du système

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (3.76)$$

Sachant que $\hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = |\psi(t)\rangle$, on en déduit l'équation différentielle

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t) |\psi(t)\rangle. \quad (3.77)$$

Pour conclure, il ne nous reste plus qu'à identifier la grandeur physique associée à l'observable $\hat{H}(t)$. Pour cela, considérons le cas particulier de ce qu'on appellera un *système isolé*. Par définition, on dira d'un système physique qu'il est isolé lorsque son évolution temporelle est invariante par translation dans le temps. L'opérateur d'évolution $\hat{U}(t, t_0)$ ne dépendra alors que du temps écoulé $t - t_0$ entre l'instant initial t_0 et l'instant final t , ce qui nous permettra d'utiliser la notation simplifiée $\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t - t_0)$ pour représenter cet opérateur. Une autre conséquence de l'invariance par translation dans le temps est que les éq. 3.75 et 3.77 gouvernant l'évolution du système doivent être indépendantes de l'instant considéré. On en déduit que l'opérateur hermitien $\hat{H}(t)$ est indépendant du temps, auquel cas il sera simplement noté $\hat{H}$. L'éq. 3.75 se réduit donc à

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t). \quad (3.78)$$

Il s'agit d'une équation différentielle du premier ordre en temps à coefficients constants, qui se résout de la même manière qu'une équation du premier ordre portant sur une grandeur scalaire. On peut donc écrire

$$\hat{U}(t) = \hat{U}(0) \exp \left(-i \frac{\hat{H}t}{\hbar} \right) = \exp \left(-i \frac{\hat{H}t}{\hbar} \right), \quad (3.79)$$

où l'on a utilisé la condition initiale $\hat{U}(0) = \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}$. Pour s'assurer qu'il s'agit bien de la solution de l'équation différentielle, on peut décomposer en séries entières l'expression proposée

pour $\hat{U}(t)$, soit

$$\hat{U}(t) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{k!} \left(-i \frac{\hat{H}t}{\hbar} \right)^k \quad (3.80)$$

puis dériver par rapport au temps. On obtient

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{k!} \left(-i \frac{\hat{H}}{\hbar} \right)^k k t^{k-1} = -i \frac{\hat{H}}{\hbar} \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{(k-1)!} \left(-i \frac{\hat{H}}{\hbar} \right)^{k-1} t^{k-1} = -i \frac{\hat{H}}{\hbar} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{k!} \left(-i \frac{\hat{H}t}{\hbar} \right)^k, \quad (3.81)$$

où l'on reconnaît bien $-i\hat{H}\hat{U}(t)/\hbar$ dans le membre de droite. L'expression proposée est donc bien solution de l'éq. 3.78. On en déduit que

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle. \quad (3.82)$$

En comparant ce résultat avec l'expression des ondes de de Broglie en $\exp(-iEt/\hbar)$ discutées au chapitre 1, ou encore avec l'évolution en $\exp(-iEt/\hbar)$ de l'état de polarisation du photon considéré au chapitre 2, il apparaît clairement que l'opérateur hermitien $\hat{H}$ n'est autre que l'observable associée à l'énergie du système. Par analogie avec le formalisme lagrangien de la mécanique classique, cette observable sera dorénavant appelée l'*Hamiltonien* du système.

3.4.3 Equation de Schrödinger

En nous appuyant sur les résultats obtenus ci-dessus dans le cadre d'une démarche inductive, nous sommes maintenant en mesure d'introduire le troisième postulat de la physique quantique, venant généraliser le postulat proposé en 2.4.1.

Principe 3 : Évolution temporelle

L'évolution de l'état $|\psi(t)\rangle$ du système est gouvernée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \quad (3.83)$$

où $\hat{H}(t)$ est une observable appelée Hamiltonien et représentant l'énergie du système. Dans le cas d'un système isolé, l'Hamiltonien est indépendant du temps et sera noté simplement $\hat{H}$.

L'équation de Schrödinger étant une équation différentielle du premier ordre en temps, on peut en déduire que, pour une condition initiale $|\psi(t_0)\rangle$ donnée, la solution est unique, ce qui est évidemment satisfaisant : le ket $|\psi(t_0)\rangle$ contient toute l'information sur l'état du système et permet bien de déterminer de manière unique l'évolution ultérieure de cet état. Pour déterminer explicitement l'évolution de l'état $|\psi(t)\rangle$ pour un Hamiltonien $\hat{H}(t)$ dépendant du temps, il sera nécessaire de résoudre directement l'équation de Schrödinger, ce que nous ferons en particulier au chapitre 9 quand nous étudierons la résonance magnétique nucléaire, associée à l'application au système d'un champ magnétique dépendant du temps. Mais dans le cas d'un système isolé, l'Hamiltonien $\hat{H}$ ne dépend pas du temps. Il est alors fructueux de déterminer ses états propres $\{|\psi_n\rangle\}$ définis par

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad (3.84)$$

où les nombres réels E_n sont les valeurs propres de l'Hamiltonien. Cette équation aux valeurs propres est parfois appelée équation de Schrödinger indépendante du temps. Nous avons supposé ici que le spectre de l'Hamiltonien était discret (*i.e.* dénombrable), ce qui nous a permis de repérer les vecteurs propres et valeurs propres à l'aide d'un nombre entier n . D'après le théorème spectral, on peut alors décomposer l'état $|\psi(t)\rangle$ du système dans la base orthonormée $\{|\psi_n\rangle\}$, soit

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n\rangle, \quad (3.85)$$

où $c_n(t) = \langle \psi_n | \psi(t) \rangle$. En remplaçant dans l'équation de Schrödinger, on obtient

$$i\hbar \sum_n \frac{dc_n}{dt} |\psi_n\rangle = \hat{H} \sum_n c_n(t) |\psi_n\rangle, \quad (3.86)$$

ou encore, sachant que $\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$,

$$\sum_n i\hbar \frac{dc_n}{dt} |\psi_n\rangle = \sum_n c_n(t) E_n |\psi_n\rangle. \quad (3.87)$$

En identifiant dans la base $\{|\psi_n\rangle\}$ les coefficients apparaissant dans les deux membres de l'équation ci-dessus, on obtient une série d'équations différentielles indépendantes les unes des autres

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} = E_n c_n(t), \quad (3.88)$$

ou encore

$$\frac{dc_n}{dt} = -i \frac{E_n}{\hbar} c_n(t). \quad (3.89)$$

On en déduit immédiatement la solution

$$c_n(t) = e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} c_n(t_0), \quad (3.90)$$

avec $c_n(t_0) = \langle \psi_n | \psi(t_0) \rangle$. On peut en déduire l'expression générale de l'état du système

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \exp\left(-i \frac{E_n(t-t_0)}{\hbar}\right) c_n(t_0) |\psi_n\rangle. \quad (3.91)$$

Ce résultat est extrêmement important car il signifie que, dans le cas d'un système isolé, on n'aura jamais besoin de résoudre explicitement l'équation de Schrödinger. Il suffira de diagonaliser l'Hamiltonien $\hat{H}$, puis d'écrire directement la solution à l'aide de l'éq. 3.91.

Remarquons que dans le cas particulier où l'état initial est un état propre de l'Hamiltonien, *i.e.* $\hat{H} |\psi(t_0)\rangle = E |\psi(t_0)\rangle$, alors le ket

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle \quad (3.92)$$

est l'unique solution de l'équation de Schrödinger. L'évolution temporelle se résume alors à un facteur de phase global, qui n'aura pas d'effet sur les probabilités de mesure ou sur les valeurs moyennes

des grandeurs physiques. En effet, la valeur moyenne d'une grandeur physique A à l'instant t s'écrit

$$\langle A \rangle_t = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \quad (3.93)$$

$$= \langle \psi(t_0) | e^{iE(t-t_0)/\hbar} \hat{A} e^{-iE(t-t_0)/\hbar} | \psi(t_0) \rangle \quad (3.94)$$

$$= \langle \psi(t_0) | \hat{A} | \psi(t_0) \rangle \quad (3.95)$$

$$= \langle A \rangle_{t_0} \quad (3.96)$$

La valeur moyenne $\langle A \rangle$ est donc indépendante du temps. Pour cette raison, un tel état est appelé *état stationnaire*. L'éq. 3.91 peut donc être interprétée comme une superposition linéaire d'états stationnaires, donnant lieu à un état non stationnaire dès lors qu'au moins deux états d'énergies différentes contribuent à la somme.

3.4.4 Propriétés de l'opérateur d'évolution

En prenant comme point de départ le postulat ci-dessus introduisant l'équation de Schrödinger, on peut bien entendu retrouver les propriétés établies plus haut sur l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t, t_0)$. On retrouvera sans peine l'éq. 3.75 gouvernant l'évolution de l'opérateur d'évolution en remplaçant $|\psi(t)\rangle$ par $\hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$ dans l'équation de Schrödinger, ce qui nous donne l'équation différentielle du premier ordre

$$\frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0). \quad (3.97)$$

Alors que nous avons implicitement supposé que t était supérieur ou égal à t_0 quand nous avons introduit l'opérateur d'évolution en 3.4.1, nous pouvons maintenant définir la grandeur $\hat{U}(t, t_0)$ pour toute valeur de t comme l'unique solution de l'éq. 3.97 satisfaisant la condition initiale $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}$. Pour deux instants t_0 et t quelconques, on pourra donc écrire $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$ mais aussi $|\psi(t_0)\rangle = \hat{U}(t_0, t) |\psi(t)\rangle$. On en déduit que l'opérateur d'évolution est inversible, avec

$$\hat{U}(t, t_0)^{-1} = \hat{U}(t_0, t). \quad (3.98)$$

En multipliant l'éq. 3.68 à droite par $\hat{U}(t, t_0)^{-1}$, on en déduit que $\hat{U}(t, t_0)^{-1} = \hat{U}(t, t_0)^\dagger$ et donc que l'opérateur d'évolution est un opérateur unitaire (voir annexe A.1). Cette propriété peut encore être formulée selon la relation

$$\hat{U}(t, t_0) \hat{U}(t, t_0)^\dagger = \hat{U}(t, t_0)^\dagger \hat{U}(t, t_0) = \hat{I}. \quad (3.99)$$

Dans le cas d'un système isolé, il est possible de calculer l'expression explicite de l'opérateur d'évolution en s'appuyant sur le fait que l'hamiltonien est alors indépendant du temps. On peut effectuer le calcul en se plaçant dans la base propre $\{|\psi_n\rangle\}$ de l'hamiltonien $\hat{H}$. D'après l'éq. 3.91, on peut alors écrire

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}(t - t_0)\right) |\psi_n\rangle \quad (3.100)$$

où $c_n(t_0) = \langle \psi_n | \psi(t_0) \rangle$. En plaçant ce dernier coefficient à droite du ket $|\psi_n\rangle$ dans l'expression ci-dessus et en utilisant $|\psi_n\rangle c_n(t_0) = |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi(t_0) \rangle = (|\psi_n\rangle \langle \psi_n |) |\psi(t_0)\rangle$, on obtient

$$|\psi(t)\rangle = \left(\sum_n \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)\right) |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \right) |\psi(t_0)\rangle \quad (3.101)$$

ce qui correspond bien à l'action d'un opérateur sur l'état initial $|\psi(t_0)\rangle$, l'opérateur en question s'écrivant

$$\hat{U}(t-t_0) = \sum_n \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)\right) |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \quad (3.102)$$

ou encore, sous forme matricielle,

$$\hat{U}(t-t_0) = \begin{pmatrix} e^{-iE_0(t-t_0)/\hbar} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & e^{-iE_1(t-t_0)/\hbar} & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & e^{-iE_2(t-t_0)/\hbar} & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.103)$$

Sans surprise, on retrouve bien l'expression dans la base propre de l'exponentielle d'opérateur donnée par l'éq. 3.79.

3.5 Commutation des observables

De manière générale, les opérateurs intervenant en physique quantique ne commutent pas nécessairement entre eux. On caractérise cette propriété à l'aide du *commutateur*

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (3.104)$$

Le calcul d'un commutateur se trouvera simplifié en exploitant sa bilinéarité – qui pourra souvent éviter un développement fastidieux. On donne également les identités bien utiles

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}, \quad (3.105)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}. \quad (3.106)$$

On peut par exemple démontrer l'éq. 3.105 en écrivant

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} \quad (3.107)$$

$$= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} \quad (3.108)$$

$$= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}. \quad (3.109)$$

3.5.1 Deux observables qui commutent

Dans le cas où deux opérateurs commutent ($[\hat{A}, \hat{B}] = 0$), on peut affirmer que tout sous-espace propre de $\hat{A}$ est stable sous l'action de $\hat{B}$. En effet, soit $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_a$, où $\mathcal{E}_a$ est le sous-espace propre de

$\hat{A}$ associé à la valeur propre a . On a alors $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ et on peut écrire

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = \hat{B}a|\psi\rangle = a(\hat{B}|\psi\rangle) \quad (3.110)$$

ce qui signifie que $\hat{B}|\psi\rangle \in \mathcal{E}_a$. L'espace $\mathcal{E}_a$ est donc bien stable sous l'action de l'opérateur $\hat{B}$.

On peut en déduire une propriété très importante : il existe une **base propre commune** aux deux observables $\hat{A}$ et $\hat{B}$. En effet, comme $\mathcal{E}_a$ est stable par $\hat{B}$, on peut se placer à l'intérieur de cet espace et y diagonaliser la restriction de $\hat{B}$ pour construire une base propre de $\mathcal{E}_a$ pour les restrictions de $\hat{A}$ (qui dans cet espace est proportionnelle à l'identité) et de $\hat{B}$. En répétant cette opération pour chaque sous-espace propre de $\hat{A}$, on construit ainsi une base propre commune à ces deux observables pour l'ensemble de l'espace. En appelant a_m et b_n les valeurs propres de $\hat{A}$ et $\hat{B}$, on peut noter la base propre commune $\{|\psi_{m,n,p}\rangle\}$, avec

$$\hat{A}|\psi_{m,n,p}\rangle = a_m|\psi_{m,n,p}\rangle \quad (3.111)$$

$$\hat{B}|\psi_{m,n,p}\rangle = b_n|\psi_{m,n,p}\rangle \quad (3.112)$$

L'indice p est nécessaire car les espaces propres communs à $\hat{A}$ et $\hat{B}$ pour un couple donné de valeurs propres (a_m, b_n) peuvent *a priori* être de dimension supérieure à 1.

On dit de deux observables qui commutent entre elles qu'elles sont *compatibles*, ce qui signifie qu'il est possible d'avoir simultanément connaissance des valeurs prises par les deux grandeurs physiques associées. En effet, supposons que le système soit dans l'état initial

$$|\psi\rangle = \sum_{m,n,p} c_{m,n,p} |\psi_{m,n,p}\rangle. \quad (3.113)$$

Mesurons dans un premier temps la grandeur A et supposons que l'on obtienne le résultat a_m . À l'issue de cette mesure, le postulat de la mesure stipule que le système est projeté dans le sous-espace propre associé à la valeur propre a_m , de sorte que l'état après la mesure est proportionnel à

$$|\psi'\rangle = \sum_{n,p} c_{m,n,p} |\psi_{m,n,p}\rangle. \quad (3.114)$$

Si l'on mesure maintenant la grandeur B et que l'on obtient le résultat b_n , on va projeter le vecteur $|\psi'\rangle$ dans le sous-espace propre associé à la valeur propre b_n , ce qui – après normalisation – nous donne l'état

$$|\psi''\rangle = \frac{\sum_p c_{m,n,p} |\psi_{m,n,p}\rangle}{\sum_p |c_{m,n,p}|^2}. \quad (3.115)$$

Pour un même couple (a_m, b_n) de valeurs mesurées, l'état obtenu aurait évidemment été le même si on avait mesuré les deux grandeurs physiques dans l'ordre inverse. Par abus de langage, on pourra donc dire que l'on a mesuré les deux grandeurs simultanément. L'état $|\psi''\rangle$ est un état propre commun aux deux observables, ce qui signifie qu'une nouvelle mesure de A et B effectuée immédiatement après donnerait avec certitude les mêmes valeurs a_m et b_n . Comme annoncé plus haut, on a donc bien une connaissance simultanée des deux grandeurs. Comme on le verra plus loin, la situation sera très différente pour deux observables qui ne commutent pas.

3.5.2 Ensemble Complet d'Observables qui Commutent

Un ensemble $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$ d'observables est appelé Ensemble Complet d'Observables qui Commutent (ECOC) lorsque les deux propriétés ci-dessous sont vérifiées :

- Les observables de l'ECOC commutent entre elles deux à deux.
- Leurs espaces propres communs sont de dimension égale à 1.

Compte tenu de la définition même d'un ECOC, il existe une et une seule base propre commune à toutes les observables de l'ECOC. Par exemple, pour un ECOC $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}\}$ constitué de trois observables, on pourra écrire

$$\hat{A}|\psi_{m,n,p}\rangle = a_m|\psi_{m,n,p}\rangle \quad (3.116)$$

$$\hat{B}|\psi_{m,n,p}\rangle = b_n|\psi_{m,n,p}\rangle \quad (3.117)$$

$$\hat{C}|\psi_{m,n,p}\rangle = c_p|\psi_{m,n,p}\rangle \quad (3.118)$$

où les vecteurs de base $|\psi_{m,n,p}\rangle$ sont définis de manière unique (chacun à une phase près). La notion d'ECOC est importante d'un point de vue expérimental car elle nous donne une procédure pour préparer le système dans un état parfaitement déterminé. En effet, à l'issue d'une mesure de toutes les grandeurs physiques associées aux observables de l'ECOC, compatibles entre elles d'après ce que nous avons vu plus haut, on disposera d'un triplet de nombre (a_m, b_n, c_p) nous indiquant avec certitude que le système est dans l'état $|\psi_{m,n,p}\rangle$. En d'autres termes, pour préparer le système dans un état donné (choisi bien entendu parmi les états propres commun de l'ECOC), il suffit de répéter la mesure des observables jusqu'à obtenir l'ensemble de valeurs propres souhaitées.

3.5.3 Deux observables qui ne commutent pas

A l'inverse de la situation discutée en 3.5.1, deux observables $\hat{A}$ et $\hat{B}$ qui ne commutent pas sont associées à des grandeurs physiques dites *incompatibles*. En d'autres termes, il ne sera pas possible de connaître avec certitude les deux grandeurs physiques associées. En effet, une mesure de $\hat{A}$ projette l'état initial $|\psi\rangle$ dans un état $|\psi'\rangle$, état propre de $\hat{A}$ pour la valeur mesurée a . Une mesure ultérieure de $\hat{B}$ va projeter l'état $|\psi'\rangle$ dans un état $|\psi''\rangle$, état propre de $\hat{B}$ pour la valeur mesurée b . Mais comme $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, l'état $|\psi''\rangle$ n'a *a priori* aucune raison d'être un état propre de l'observable $\hat{A}$. La mesure de $\hat{B}$ pourra donc nous faire perdre tout ou partie de l'information dont nous disposions à l'issue de la mesure de $\hat{A}$. Nous reviendrons sur ce problème au chapitre 5 quand nous établirons l'inégalité de Heisenberg (5.2).

3.5.4 Théorème d'Ehrenfest

Intéressons-nous à l'évolution temporelle de la valeur moyenne $\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle$ d'un opérateur $\hat{A}$ ne dépendant pas explicitement du temps. La dérivée par rapport au temps de la valeur moyenne s'écrit

$$\frac{d}{dt} \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \frac{d\langle\psi(t)|}{dt} \hat{A} |\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)| \hat{A} \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}. \quad (3.119)$$

L'équation de Schrödinger permet de calculer la dérivée du ket par rapport au temps, $d|\psi(t)\rangle/dt = 1/(i\hbar)\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$. Par conjugaison, on obtient la dérivée du bra $d\langle\psi(t)|/dt = -1/(i\hbar)\langle\psi(t)|\hat{H}(t)$. En remplaçant dans l'éq. 3.119, on obtient

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left(-\langle\psi(t)|\hat{H}(t)\hat{A}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\hat{A}\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \right) \quad (3.120)$$

ce qui nous permet d'établir le *théorème d'Ehrenfest* :

$$\frac{d}{dt} \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle\psi(t)|[\hat{A}, \hat{H}(t)]|\psi(t)\rangle. \quad (3.121)$$

Ce théorème permet d'établir facilement deux résultats importants :

- Toute grandeur physique associée à une observable $\hat{A}$ commutant avec l'hamiltonien se conserve. En effet, pour une observable $\hat{A}$ telle que $[\hat{A}, \hat{H}(t)] = 0$, l'éq. 3.121 nous donne directement $d\langle A \rangle/dt = 0$.
- Pour un système isolé, l'énergie se conserve. Il s'agit d'un cas particulier du résultat précédent, puisque pour un système isolé l'hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps et commute évidemment avec lui-même.

Chapitre 4

Mécanique quantique

Dans ce chapitre nous allons appliquer les postulats de la physique quantique introduits plus haut au cas d'un problème de *mécanique*, à savoir le mouvement d'une particule ponctuelle dans un espace euclidien à trois dimensions. Il s'agit donc d'un problème de *mécanique quantique*, au sens propre du terme de mécanique – même si pour des raisons historiques on parle souvent de mécanique quantique pour désigner par extension l'ensemble de la physique quantique. Pour simplifier, on considérera dans un premier temps le mouvement d'une particule selon une seule dimension spatiale, l'axe x . Le premier exemple de grandeur physique qui vient à l'esprit pour un tel problème est bien entendu la position x de la particule. Comme pour les grandeurs physiques considérées précédemment, on peut s'attendre à ce qu'une mesure de position de la particule donne un résultat aléatoire. Mais, contrairement aux grandeurs discrètes considérées dans les deux chapitres précédents, la position x à laquelle on observe la particule est une *variable continue* pouvant prendre n'importe quelle valeur réelle. Le spectre de l'observable position $\hat{x}$ est donc *a priori* l'ensemble $\mathbb{R}$ des nombres réels. Le spectre étant infini, l'espace des états est nécessairement de dimension infinie.

4.1 Position

4.1.1 Cas discret

Considérons dans un premier temps le cas d'une particule dont la position ne pourrait prendre que des valeurs discrètes, comme par exemple dans un modèle simplifié⁽ⁱ⁾ de polymère où un électron serait positionné sur l'un des sites atomiques, numérotés n , dans une chaîne périodique de période a , comme représenté Fig. 4.1. On dira que la particule est alors dans l'état $|n\rangle$, où $n \in \mathbb{Z}$ représente le numéro du site considéré. L'ensemble des états $|n\rangle$ constitue alors une base de notre espace des états, ce qui nous permet d'écrire la relation de fermeture

$$\hat{I} = \sum_n |n\rangle \langle n|. \quad (4.1)$$

Rappelons qu'en appliquant cette expression de l'identité à l'état $|\psi\rangle$ du système, on obtient

⁽ⁱ⁾En réalité, il y a une alternance entre simples et doubles liaisons dans le cas du polyacétylène (comme représenté Fig. 4.1(a)), de sorte que les sites $|n\rangle$ ne sont pas parfaitement équidistants. Mais pour simplifier nous supposons ici que les sites sont équidistants.

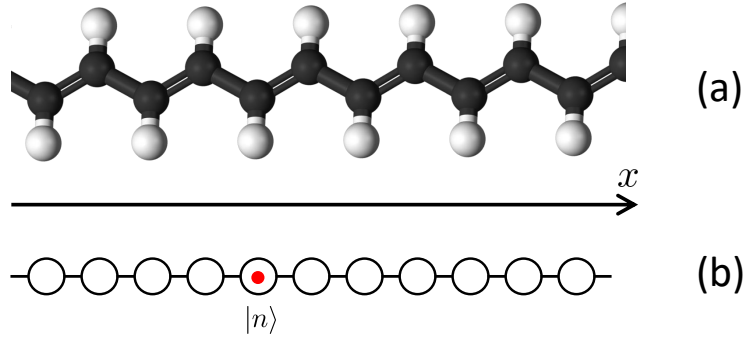


FIGURE 4.1 – (a) Structure chimique du polyacétylène, polymère conducteur constitué de la répétition périodique du motif CH. (b) Modèle très simplifié du polyacétylène, l'espace des états étant engendré par les kets $|n\rangle$ correspondant chacun à un électron localisé sur le site numéro $n \in \mathbb{Z}$.

$$|\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle, \quad (4.2)$$

où l'on retrouve la décomposition du ket $|\psi\rangle$ dans la base $\{|n\rangle\}$, avec des coefficients complexes $c_n = \langle n|\psi\rangle$. Dans un tel modèle, la base $\{|n\rangle\}$ constitue une base propre de l'observable position $\hat{x}$, associée aux valeurs propres na . On peut donc écrire

$$\hat{x} = \sum_n na |n\rangle \langle n|. \quad (4.3)$$

Si la particule est dans un état $|\psi\rangle$ arbitraire, la grandeur $c_n = \langle n|\psi\rangle$, souvent appelée une *amplitude de probabilité*, est telle que le carré de son module, $|c_n|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2$, nous donne la probabilité que la particule se trouve dans l'état $|n\rangle$, ce qui revient à dire ici que la position de la particule est le point d'abscisse $x = na$. Nous allons maintenant généraliser ce modèle très simple au cas d'un monde continu, ce qui revient à faire tendre a vers zéro.

4.1.2 Notion de fonction d'onde

Considérons maintenant le cas évoqué dans l'introduction du chapitre où la position x de la particule devient une variable continue, pouvant prendre n'importe quelle valeur réelle. On appelle $\hat{x}$ l'observable associée à la position x de la particule, et $|x\rangle$ le vecteur propre associé à la valeur propre réelle x , soit

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle. \quad (4.4)$$

Comme dans le cas discret, nous pouvons écrire une relation de fermeture, mais il nous faut remplacer la somme discrète par une intégrale en raison de la nature continue de la variable x . L'éq. 4.1 devient ainsi

$$\hat{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| dx. \quad (4.5)$$

En écrivant l'état $|\psi\rangle$ du système sous la forme $|\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle$ et en remplaçant l'identité par l'expression ci-dessus, on obtient

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x|\psi\rangle dx. \quad (4.6)$$

Cette expression est parfaitement analogue à l'éq. 4.2 obtenue dans le cas d'une base discrète. L'état du système est ainsi entièrement déterminé par la donnée des nombres complexes $\langle x|\psi\rangle$ pour toutes les valeurs de $x \in \mathbb{R}$. On voit ainsi apparaître un nouvel objet mathématique représentant l'état du système. Ce dernier est ainsi entièrement caractérisé par la fonction qui à $x \in \mathbb{R}$ associe la grandeur complexe

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \quad (4.7)$$

Cette fonction de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{C}$ est appelée la *fonction d'onde*. Le ket $|\psi\rangle$ étant normé, cette fonction d'onde doit satisfaire une condition de normalisation. En effet, en utilisant l'éq. 4.6 on obtient

$$\langle \psi|\psi\rangle = \langle \psi| \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x|\psi\rangle dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi|x\rangle \langle x|\psi\rangle dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\langle x|\psi\rangle|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx. \quad (4.8)$$

On en déduit la relation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (4.9)$$

On peut en déduire que l'espace des états $\mathcal{E}_H$ est homéomorphe à l'espace vectoriel noté $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ des fonctions de carré sommable de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{C}$.

4.1.3 Densité de probabilité de présence

En écrivant $\hat{x} = \hat{x}\hat{I}$ et en exprimant $\hat{I}$ à l'aide de l'éq. 4.6, on peut en déduire l'expression de l'opérateur position sous la forme

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x |x\rangle \langle x| dx, \quad (4.10)$$

où l'on reconnaît la version continue d'une matrice diagonale. Considérons maintenant une mesure de position. En pratique, la mesure sera effectuée de manière discrète en raison de la résolution δx finie associée à une mesure expérimentale de position. Celle-ci pourra par exemple consister en une mesure de la lumière émise ou diffusée par la particule considérée, dont on déterminera la position à l'aide d'une caméra munie de pixels de taille δx . Considérons le cas où la particule est détectée au niveau du pixel de position x_0 et de largeur δx . Selon le postulat de la mesure dans le cas dégénéré discuté en 3.3.3, il nous faut écrire le projecteur $\hat{P}_{x_0}$ sur le sous-espace propre engendré par les états $|x\rangle$ pour $x \in [x_0 - \delta x/2, x_0 + \delta x/2]$. On peut facilement transposer l'éq. 3.45 au cas continu en remplaçant la somme discrète par une intégrale, ce qui nous donne

$$\hat{P}_{x_0} = \int_{x_0 - \delta x/2}^{x_0 + \delta x/2} |x\rangle \langle x| dx. \quad (4.11)$$

Selon le postulat de la mesure, la probabilité de détecter la particule sur le pixel x_0 considéré s'écrit

$$\mathcal{P}(x_0 - \delta x/2 \leq x < x_0 + \delta x/2) = \langle \psi | \hat{P}_{x_0} | \psi \rangle = \int_{x_0 - \delta x/2}^{x_0 + \delta x/2} \langle \psi | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx. \quad (4.12)$$

On en déduit la probabilité de mesure

$$\mathcal{P}(x_0 - \delta x/2 \leq x < x_0 + \delta x/2) = \int_{x_0 - \delta x/2}^{x_0 + \delta x/2} |\psi(x)|^2 dx. \quad (4.13)$$

En faisant tendre δx vers zéro, on peut se placer dans une situation où la résolution δx de la mesure de position est beaucoup plus petite que l'échelle caractéristique de variation de la fonction $|\psi(x)|^2$, ce qui nous permet de supposer que cette dernière est constante dans l'intervalle $[x_0 - \delta x/2, x_0 + \delta x/2]$. Dans ce régime, on peut alors écrire $\mathcal{P}(x_0 - \delta x/2 \leq x < x_0 + \delta x/2) \approx |\psi(x_0)|^2 \delta x$. Cette expression nous permet d'attribuer un sens physique très clair à la grandeur $|\psi(x_0)|^2$: il s'agit tout simplement de la densité de probabilité de présence de la particule au point x_0 . En d'autres termes, la grandeur $|\psi(x)|^2 dx$ correspond à la probabilité de trouver la particule dans un intervalle infinitésimal de largeur dx situé au point x . La transposition du cas discret au cas continu est ainsi très simple : de même que $|c_n|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2$ représente la probabilité de trouver la particule sur le site n , la grandeur $|\psi(x)|^2 = |\langle x|\psi\rangle|^2$ est la densité de probabilité de présence au point x . On peut remarquer que selon l'éq. 4.9 la fonction positive ou nulle $|\psi(x)|^2$ satisfait bien la condition de normalisation requise pour une densité de probabilité.

4.1.4 Produit scalaire hermitien dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

Il est utile d'expliciter le produit scalaire hermitien en termes de fonctions d'onde. En remplaçant $|\psi\rangle$ par $|\psi_2\rangle$ dans l'éq. 4.6 et en multipliant à gauche par le bra $\langle\psi_1|$, on peut écrire le produit scalaire hermitien $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ entre deux kets quelconques selon l'expression

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x|\psi_2\rangle dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle\psi_1|x\rangle \langle x|\psi_2\rangle dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx. \quad (4.14)$$

Cette expression est bien anti-linéaire à gauche et linéaire à droite, comme attendu pour un produit scalaire hermitien. Son application au calcul du carré de la norme d'un ket $|\psi\rangle$ quelconque nous permet bien de retrouver l'éq. 4.8 déjà obtenue plus haut.

Pour résumer, on peut décrire comme suit l'espace des états associé au mouvement d'une particule ponctuelle dans un espace unidimensionnel.

Mouvement d'une particule ponctuelle à 1D

L'espace des états $\mathcal{E}_H$ associé au mouvement unidimensionnel d'une particule ponctuelle est homéomorphe à l'espace $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ des fonctions de carré sommable de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{C}$. L'état $|\psi\rangle$ du système est ainsi entièrement déterminé par la fonction d'onde $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$, où $|x\rangle$ est le vecteur propre de l'observable position $\hat{x}$ associée à la valeur propre x . La grandeur $|\psi(x)|^2 = |\langle x|\psi\rangle|^2$ représente la densité de probabilité de trouver la particule au point x .

L'espace $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ est muni du produit scalaire hermitien

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx. \quad (4.15)$$

En appliquant cette expression au carré de la norme de l'état $|\psi\rangle$ du système, on obtient la condition de normalisation de la fonction d'onde

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (4.16)$$

4.1.5 Spectre continu et fonction de Dirac

Comme nous avons établi que nous pouvions définir l'état du système aussi bien à l'aide du ket $|\psi\rangle$ que de la fonction d'onde $\psi(x)$, puisque $\mathcal{E}_H$ et $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ sont deux espaces vectoriels homéomorphes, il est naturel de considérer la fonction d'onde associée à un élément donné de la base continue $\{|x\rangle\}$ considérée plus haut. D'après l'éq. 4.7, on peut écrire

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_x(x')\psi(x')dx', \quad (4.17)$$

où $x' \mapsto \delta_x(x') = \langle x'|x\rangle$ est la fonction d'onde associée au ket $|x\rangle$. Cette expression est la définition même de la fonction de Dirac centrée au point x , car selon l'annexe A.3 on peut écrire

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-x')\psi(x')dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x')\psi(x'-x)dx'. \quad (4.18)$$

On en déduit que la fonction d'onde $\delta_x(x')$ associée au ket $|x\rangle$ n'est autre que la fonction de Dirac centrée au point x , définie par

$$\delta_x(x') = \delta(x' - x). \quad (4.19)$$

Comme discuté en A.3, la fonction de Dirac est nulle partout sauf à l'origine où elle prend une valeur infinie, de sorte que son intégrale est égale à 1. Il ne s'agit donc pas d'une fonction au sens mathématique du terme mais d'une distribution. Toutefois, l'usage en physique est de faire comme s'il s'agissait d'une fonction qui n'interviendra que dans des intégrales comme par exemple l'éq. 4.17, qui correspond en réalité à l'action de la distribution δ_x sur la fonction d'onde $\psi(x)$, noté en physique comme le produit du bra $\langle x|$ par le ket $|\psi\rangle$. Le fait que la fonction d'onde associée au ket $|x\rangle$ soit $x' \mapsto \delta(x' - x)$ peut encore s'écrire

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x). \quad (4.20)$$

Cette expression se substitue pour une base continue à la condition de normalisation d'une base orthonormée discrète ($\langle \psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{n,m}$), la fonction de Dirac $\delta(x' - x)$ venant remplacer le symbole de Kronecker $\delta_{n,m}$. On en déduit que les éléments de la base continue $\{|x\rangle\}$ sont bien orthogonaux mais qu'ils ne sont ni normés ni normalisables, puisqu'on a

$$\langle x|x\rangle = \delta(0) = +\infty. \quad (4.21)$$

Le ket $|x\rangle$, dont la fonction d'onde correspond à une particule qui serait parfaitement localisée au point x , n'est donc pas un état physique. On atteint ici les limites du théorème spectral dans le cas d'une observable dont le spectre est continu. Comme pour une observable dont le spectre est discret, les vecteurs propres $\{|x\rangle\}$ constituent bien une base de vecteurs orthogonaux de $\mathcal{E}_H$, mais les vecteurs de base eux-mêmes n'appartiennent pas à l'espace $\mathcal{E}_H$ puisque leur norme est infinie. Cette propriété concerne non seulement l'observable position, mais plus largement toute observable dont le spectre de valeurs propres est continu. Considérons ainsi de manière générale une observable $\hat{A}$ dont les vecteurs propres $|a\rangle$ constituent une base continue de $\mathcal{E}_H$, où a appartient au spectre de $\hat{A}$, supposé continu et non dégénéré. Le fait que ces vecteurs propres constituent une base continue

de $\mathcal{E}_H$ nous permet d'écrire la relation de fermeture

$$\hat{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} |a'\rangle \langle a'| da'. \quad (4.22)$$

En appliquant cette expression de l'identité au ket $|\psi\rangle$ et en multipliant à gauche par le bra $\langle a|$, on obtient

$$\langle a|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle a|a'\rangle \langle a'|\psi\rangle da'. \quad (4.23)$$

Si on note $f(a) = \langle a|\psi\rangle$ la fonction qui à a associe $\langle a|\psi\rangle$, on obtient donc

$$f(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(a') \langle a|a'\rangle da'. \quad (4.24)$$

D'après l'éq. A.25, la relation ci-dessus, valable pour toute fonction $f(a)$, est la définition même de la fonction de Dirac. On peut donc en déduire pour toute base continue la relation

$$\langle a|a'\rangle = \delta(a - a') = \delta(a' - a). \quad (4.25)$$

Cette relation vient remplacer la relation d'orthonormalité rencontrée pour une base dénombrable. On en déduit en particulier $\langle a|a\rangle = \delta(0) = +\infty$. Les vecteurs propres d'un opérateur dont le spectre est continu ne peuvent donc pas appartenir à notre espace de Hilbert, ce que nous avons déjà rencontré pour les vecteurs propres de l'opérateur position.

4.2 Impulsion

Comme discuté en 1.1.1, l'état d'une particule classique ponctuelle est entièrement déterminé par sa position x et son impulsion $p_x = mv_x$. Après avoir considéré l'observable position $\hat{x}$, il est donc naturel de nous tourner maintenant vers l'observable impulsion $\hat{p}_x$.

4.2.1 Fonctions propres de l'observable impulsion

Afin de déterminer la forme prise par l'observable impulsion, nous allons partir de ses états propres, c'est-à-dire d'états pour lesquels l'impulsion de la particule est une grandeur bien définie. Nous avons vu au chapitre 1 que, selon l'hypothèse formulée par de Broglie et confirmée par l'expérience, le mouvement d'une particule d'impulsion p_x pouvait être caractérisé par une onde plane de vecteur d'onde $k = p_x/\hbar$. Si on appelle $|p_x\rangle$ le ket correspondant à cet état d'impulsion bien définie, on peut donc écrire la fonction d'onde correspondante sous la forme

$$\langle x|p_x\rangle = \lambda e^{ip_x x/\hbar}, \quad (4.26)$$

où le préfacteur réel λ a été introduit pour garantir que les kets $|p_x\rangle$ vérifie bien la condition de normalisation définie par l'éq. 4.25. Pour déterminer λ , calculons

$$\langle p_x|p'_x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p_x|x\rangle \langle x|p'_x\rangle dx = \lambda^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p'_x - p_x)x/\hbar} dx = 2\pi\hbar\lambda^2\delta(p_x - p'_x), \quad (4.27)$$

où nous avons utilisé l'éq. A.43 constituant une autre expression très utile de la fonction de Dirac. Pour obtenir $\langle p_x | p'_x \rangle = \delta(p_x - p'_x)$, il suffit donc de choisir $\lambda = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$. On en déduit

$$\langle x | p_x \rangle = \frac{e^{ip_x x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (4.28)$$

Cette onde plane est bien entendu une idéalisation mathématique et ne correspond pas à un état physique. La densité de probabilité associé, $1/(2\pi\hbar)$, est indépendant de x de sorte que la fonction d'onde n'est évidemment pas normalisable au sens de l'éq. 4.16. En écrivant la relation de fermeture dans la base continue $\{|p_x\rangle\}$, on obtient

$$\hat{I} = \int |p_x\rangle \langle p_x| dp_x. \quad (4.29)$$

En écrivant $\hat{p}_x = \hat{p}_x \hat{I}$, on en déduit l'expression

$$\hat{p}_x = \int p_x |p_x\rangle \langle p_x| dp_x, \quad (4.30)$$

qui définit de manière unique l'observable impulsion.

4.2.2 Opérateurs dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ associés aux observables position et impulsion

L'espace des états $\mathcal{E}_H$ étant homéomorphe à $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, il est intéressant d'écrire les opérateurs linéaires agissant dans $\mathcal{E}_H$ sous forme d'opérateurs agissant directement dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Pour tout opérateur linéaire $\hat{A}$, on pourra ainsi considérer la fonction d'onde $\langle x | \hat{A} | \psi \rangle$ correspondant à l'action de $\hat{A}$ sur le ket $|\psi\rangle$. On pourra parfois écrire simplement

$$\langle x | \hat{A} | \psi \rangle = \hat{A}\psi(x), \quad (4.31)$$

où le symbole $\hat{A}$ apparaissant dans le membre de gauche correspond à l'opérateur linéaire agissant dans $\mathcal{E}_H$ tandis que le symbole $\hat{A}$ apparaissant dans le membre de droite correspond à l'opérateur linéaire agissant dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Ainsi, pour l'observable position $\hat{x}$, on a évidemment $\langle x | \hat{x} | \psi \rangle = x \langle x | \psi \rangle$, où l'on a utilisé $\langle x | \hat{x} = x \langle x |$, puisque $|x\rangle$ est par définition vecteur propre de $\hat{x}$ pour la valeur propre x . On pourra donc écrire simplement

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x). \quad (4.32)$$

Ainsi, l'opérateur $\hat{x}$ correspond tout simplement à la multiplication par x dans l'espace des fonctions d'onde $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

Cherchons de même l'action de l'opérateur impulsion $\hat{p}_x$ sur une fonction d'onde quelconque. Pour cela, utilisons le fait que les ondes planes $\exp(ikx)$ sont fonctions propres de $\hat{p}_x$ pour les valeurs propres $\hbar k$. Or, comme remarqué en 1.1.2, nous savons que ces ondes planes sont fonctions propres de l'opérateur différentiel d/dx pour la valeur propre ik , soit

$$\frac{d}{dx} e^{ikx} = ik e^{ikx}. \quad (4.33)$$

Pour obtenir la valeur propre $\hbar k$, il suffit de multiplier l'opérateur d/dx par le facteur $\hbar/i$, ce qui nous donne bien

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{ikx} = \hbar k e^{ikx}. \quad (4.34)$$

On peut en déduire que, pour chacun des vecteurs de la base continue $\{|p_x\rangle\}$, l'opérateur différentiel $(\hbar/i)d/dx$ correspond bien à l'action attendue. On peut donc en déduire de manière générale que

$$\langle x | \hat{p}_x | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx}, \quad (4.35)$$

ou encore

$$\hat{p}_x \psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx}. \quad (4.36)$$

4.2.3 Nature hermitienne des opérateurs position et impulsion

Comme attendu pour des observables, les opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}_x$ sont évidemment des opérateurs hermitiens, comme on peut le vérifier immédiatement à l'aide des éq. 4.10 et 4.30 qui expriment ces opérateurs sous forme de matrices diagonales réelles. Il peut toutefois être intéressant de vérifier directement cette propriété en considérant l'action de ces opérateurs sur les fonctions d'onde. Pour deux kets quelconques $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$, considérons tout d'abord la grandeur

$$\langle \psi_1 | \hat{x}^\dagger | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{x} | \psi_1 \rangle^* \quad (4.37)$$

$$= \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^*(x) x \psi_1(x) dx \right)^* \quad (4.38)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) x \psi_2(x) dx = \langle \psi_1 | \hat{x} | \psi_2 \rangle, \quad (4.39)$$

où l'on a utilisé le fait que x était une grandeur réelle. On en déduit que $\langle \psi_1 | \hat{x}^\dagger | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{x} | \psi_2 \rangle$ pour tous kets $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$, ce qui implique que $\hat{x}^\dagger = \hat{x}$ et confirme bien que l'opérateur position $\hat{x}$ est un opérateur hermitien.

Faisons de même pour l'opérateur impulsion et calculons

$$\langle \psi_1 | \hat{p}_x^\dagger | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{p}_x | \psi_1 \rangle^* = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi_1}{dx} dx \right)^* = -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\psi_1^*}{dx} \psi_2(x) dx. \quad (4.40)$$

A l'aide d'une intégration par parties, on obtient

$$\langle \psi_1 | \hat{p}_x^\dagger | \psi_2 \rangle = -\frac{\hbar}{i} \left[\psi_1^*(x) \psi_2(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi_2}{dx} dx. \quad (4.41)$$

Sachant que les fonctions $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ sont de carré sommable, on pourra évidemment supposer qu'elles tendent vers zéro lorsque $|x|$ tend vers l'infini, de sorte que le premier terme de l'expression ci-dessus s'annule. Quant au second terme, on reconnaît le produit scalaire hermitien entre $\psi_1(x)$ et $\hat{p}_x \psi_2(x)$, ce qui nous permet d'affirmer que $\langle \psi_1 | \hat{p}_x^\dagger | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{p}_x | \psi_2 \rangle$. Comme dans le cas précédent, le fait que cette expression soit vérifiée pour tous kets $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ nous permet d'en déduire que $\hat{p}_x^\dagger = \hat{p}_x$, et donc que l'impulsion est bien un opérateur hermitien comme attendu pour une observable.

4.2.4 Transformation de Fourier

Nous avons considéré jusqu'ici deux bases continues de notre espace des états, d'une part la base $\{|x\rangle\}$ des états propres de l'opérateur position et d'autre part la base $\{|p_x\rangle\}$ des états propres de l'opérateur impulsion. La fonction d'onde $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ correspond aux composantes du ket $|\psi\rangle$ dans la base $\{|x\rangle\}$, soit

$$|\psi\rangle = \int \psi(x) |x\rangle dx. \quad (4.42)$$

On peut décomposer ce même ket $|\psi\rangle$ dans la base $\{|p_x\rangle\}$, ce qui nous donne

$$|\psi\rangle = \int |p_x\rangle \langle p_x|\psi\rangle dp_x = \int \tilde{\psi}(p_x) |p_x\rangle dp_x, \quad (4.43)$$

où l'on a introduit une nouvelle fonction $\tilde{\psi}(p_x) = \langle p_x|\psi\rangle$ correspondant aux composantes de $|\psi\rangle$ dans la base $\{|p_x\rangle\}$. On peut obtenir l'expression de $\tilde{\psi}(p_x)$ en multipliant l'éq. 4.42 à gauche par le bra $\langle p_x|$. On obtient ainsi

$$\tilde{\psi}(p_x) = \langle p_x|\psi\rangle = \int \psi(x) \langle p_x|x\rangle dx. \quad (4.44)$$

En remplaçant $\langle p_x|x\rangle$ par le complexe conjugué de l'éq. 4.28, on obtient la relation

$$\tilde{\psi}(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-ip_x x/\hbar} dx. \quad (4.45)$$

Cette expression n'est autre que la transformée de Fourier de $\psi(x)$, que nous étudierons en détail au chapitre suivant. Afin d'exprimer maintenant $\psi(x)$ en fonction de $\tilde{\psi}(p_x)$, multiplions l'éq. 4.43 par le bra $\langle x|$. On obtient alors

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int \tilde{\psi}(p_x) \langle x|p_x\rangle dp_x. \quad (4.46)$$

En remplaçant $\langle x|p_x\rangle$ par l'onde plane donnée par l'éq. 4.28, on obtient

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(p_x) e^{ip_x x/\hbar} dp_x. \quad (4.47)$$

Comme attendu, $\psi(x)$ s'écrit comme la transformée de Fourier inverse de la fonction $\tilde{\psi}(p_x)$.

Comme résumé dans le tableau ci-dessous, nous avons mis en évidence une symétrie parfaite entre position et impulsion, les fonctions d'onde $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ et $\tilde{\psi}(p_x) = \langle p_x|\psi\rangle$ étant deux représentations mathématiques du même ket $|\psi\rangle$ représentant l'état physique du système, liées entre elles par transformée de Fourier.

Position	Impulsion
$\psi(x) = \langle x \psi\rangle$	$\tilde{\psi}(p_x) = \langle p_x \psi\rangle$
$\hat{x} x\rangle = x x\rangle$	$\hat{p}_x p_x\rangle = p_x p_x\rangle$
$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$	$\hat{p}_x\tilde{\psi}(p_x) = p_x\tilde{\psi}(p_x)$
$\langle x x'\rangle = \delta(x - x')$	$\langle p_x p'_x\rangle = \delta(p_x - p'_x)$
$\hat{I} = \int x\rangle\langle x dx$	$\hat{I} = \int p_x\rangle\langle p_x dp_x$

4.2.5 Calcul du commutateur $[\hat{x}, \hat{p}_x]$

Comme mentionné en 3.5, les observables associées à deux grandeurs physiques différentes ne commutent pas nécessairement entre elles. Pour l'illustrer, considérons le cas des observables $\hat{x}$ et $\hat{p}_x$. On peut écrire la fonction d'onde associée à $\hat{x}\hat{p}_x|\psi\rangle$ selon

$$\langle x|\hat{x}\hat{p}_x|\psi\rangle = x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x) = x\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}. \quad (4.48)$$

En inversant l'ordre des deux opérateurs, on obtient pour $\hat{p}_x\hat{x}|\psi\rangle$ la fonction d'onde

$$\langle x|\hat{p}_x\hat{x}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(x\psi(x)) = x\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx} - i\hbar\psi(x), \quad (4.49)$$

qui comprend maintenant deux termes car nous avons dû dériver le produit $x\psi(x)$. En prenant la différence entre ces deux expressions, on obtient

$$\langle x|[\hat{x}, \hat{p}_x]|\psi\rangle = [\hat{x}, \hat{p}_x]\psi(x) = i\hbar\psi(x) = i\hbar\langle x|\psi\rangle, \quad (4.50)$$

d'où l'on déduit $[\hat{x}, \hat{p}_x]|\psi\rangle = i\hbar|\psi\rangle$. Cette relation étant valable pour tout ket $|\psi\rangle$, on en déduit

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar\hat{I}. \quad (4.51)$$

Les opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}_x$ ne commutent donc pas. Comme discuté en 3.5.3, les observables $\hat{x}$ et $\hat{p}_x$ sont incompatibles. Nous verrons en 5.2.3 qu'il est impossible de connaître simultanément ces deux grandeurs avec une précision arbitraire.

En conclusion, alors que l'état d'une particule classique est entièrement caractérisé par la donnée des valeurs x et p_x , il ne sera pas possible de connaître simultanément ces deux grandeurs en mécanique quantique. L'état d'une particule quantique est donné par une fonction de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{C}$, soit exprimée dans l'espace des positions avec la fonction d'onde $\psi(x)$, soit exprimée dans l'espace des impulsions avec la transformée de Fourier $\tilde{\psi}(p_x)$ de la fonction d'onde.

4.3 Energie

4.3.1 Hamiltonien

Considérons maintenant l'Hamiltonien $\hat{H}$, observable associée à l'énergie du système. En transposant l'éq. 1.3 exprimant l'énergie totale du système en mécanique classique, on peut directement écrire

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (4.52)$$

Le premier terme décrit l'énergie cinétique du système $\hat{p}_x^2/(2m)$ et le second terme l'énergie potentielle $V(\hat{x})$, où la fonction $V(x)$ est l'énergie potentielle utilisée en mécanique classique. Ces deux termes font intervenir des fonctions d'opérateurs, dont l'expression est immédiate dans la base propre. On a par exemple $V(\hat{x})|x\rangle = V(x)|x\rangle$. En conjuguant cette expression, on a $\langle x|\hat{V}(\hat{x}) = \langle x|V(x)$, soit

$$\langle x|V(\hat{x})|\psi\rangle = V(x)\langle x|\psi\rangle = V(x)\psi(x). \quad (4.53)$$

Dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, l'action de l'observable $V(\hat{x})$ sur la fonction d'onde $\psi(x)$ revient donc simplement à multiplier par $V(x)$, soit

$$V(\hat{x})\psi(x) = V(x)\psi(x). \quad (4.54)$$

Concernant l'opérateur $\hat{p}_x^2$, on peut simplement écrire $\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x \hat{p}_x$, ce qui revient à faire agir deux fois consécutives l'opérateur différentiel $\hat{p}_x$ sur la fonction d'onde. On obtient ainsi

$$\hat{p}_x^2 \psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (4.55)$$

Ainsi, l'action de l'Hamiltonien sur la fonction d'onde s'écrit simplement

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x). \quad (4.56)$$

4.3.2 Equation de Schrödinger pour une particule ponctuelle

Considérons maintenant l'état du système décrit par le ket $|\psi(t)\rangle$ et obéissant selon l'éq. 3.83 à l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (4.57)$$

On peut alors définir une fonction d'onde $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$ dépendant maintenant à la fois du temps t et de la position x . Compte tenu de l'expression de l'Hamiltonien obtenue plus haut, on peut directement écrire l'équation de Schrödinger associée au mouvement d'une particule ponctuelle dans un potentiel $V(x)$. L'éq. 3.83 devient ici

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t). \quad (4.58)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit donc dans ce cas sous la forme d'une équation aux dérivées partielles, du premier ordre en t et du second ordre en x . L'Hamiltonien étant indépendant du temps, la résolution de cette équation passe le plus souvent par la recherche préalable des états propres de l'Hamiltonien.

4.3.3 Fonctions propres de l'Hamiltonien

Considérons un état propre $|\psi\rangle$ de l'Hamiltonien associé à la valeur propre E . Dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, l'équation aux valeurs propres $\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ s'écrit

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (4.59)$$

Il s'agit d'une équation différentielle du second ordre, dont l'ensemble des solutions constitue un espace vectoriel de dimension 2. On peut donc être tenté d'en déduire que le spectre de l'Hamiltonien est constitué de l'ensemble $\mathbb{R}$ des nombres réels et que chaque valeur propre E est dégénérée deux fois. Il s'agit toutefois ici de l'ensemble des solutions mathématiques. Comme nous verrons au chapitre 6, ainsi qu'un peu plus loin en 4.3.5, les conditions imposées à des solutions physiquement acceptables peuvent fortement limiter les valeurs propres autorisées, ou bien réduire la dégénérescence dans le cas de valeurs propres physiquement acceptables.

4.3.4 Cas d'une particule libre

Considérons à titre d'exemple le cas simple d'une particule libre, ce qui correspond à un potentiel constant que l'on peut supposer nul par un choix approprié de l'origine des énergie. L'équation aux valeurs propres s'écrit alors simplement

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + E \right) \psi(x) = 0. \quad (4.60)$$

Considérons tout d'abord le cas où E est positif. Nous pouvons alors introduire un nombre réel positif k défini par $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, soit $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$. En remplaçant dans l'éq. 4.60, on obtient

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0. \quad (4.61)$$

Les solutions de cette équation différentielle du second ordre à coefficients constants sont bien connues et peuvent s'écrire

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (4.62)$$

où A et B sont des nombres complexes. Comme attendu, l'ensemble des solutions décrit bien un espace vectoriel de dimension 2. On reconnaît dans l'éq. 4.62 la superposition linéaire de deux ondes planes de vecteurs d'onde respectifs k et $-k$, l'une se propageant vers la droite ($\exp(ikx)$) et l'autre vers la gauche ($\exp(-ikx)$). Il s'agit là des ondes de de Broglie déjà évoquées au chapitre 1, d'énergie cinétique $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$. Nous avons déjà mentionné que ces fonctions ne sont pas normalisables, mais ces solutions restent néanmoins physiquement pertinentes dans la mesure où elles nous permettront de construire des fonctions d'onde normalisables appelées *paquet d'ondes* par superposition linéaire d'ondes planes (voir chapitre 5).

Considérons maintenant le cas où E est négatif et introduisons un nombre réel positif κ défini par $\kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$, soit $E = -\hbar^2 \kappa^2 / (2m)$. L'éq. 4.60 devient alors

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} - \kappa^2 \psi(x) = 0. \quad (4.63)$$

Les solutions de cette équation différentielle du second ordre à coefficients constants s'écrivent

$$\psi(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}. \quad (4.64)$$

On obtient à nouveau un espace vectoriel de dimension 2. Toutefois, aucune des deux fonctions propres $\exp(\pm \kappa x)$ n'est physiquement acceptable en raison de la divergence exponentielle, quand x tend vers $+\infty$ pour $\exp(\kappa x)$ et quand x tend vers $-\infty$ pour $\exp(-\kappa x)$. Non seulement ces fonctions ne sont pas de carré sommable, mais il en irait de même de toute superposition linéaire où elles interviendraient. Ces solutions de l'équation aux valeurs propres ne sont donc pas physiquement pertinentes, contrairement aux ondes planes. Nous pouvons donc considérer que les valeurs propres $E < 0$ de l'Hamiltonien ne sont pas physiquement acceptables, ce qui n'est pas surprenant dans la mesure où l'énergie cinétique d'une particule est une grandeur positive ou nulle. On peut en effet écrire

$$\langle H \rangle = \langle \psi | \frac{\hat{p}_x^2}{2m} | \psi \rangle = \frac{1}{2m} \|\hat{p}_x | \psi \rangle\|^2 \geq 0. \quad (4.65)$$

Le spectre de $\hat{H}$, au sens physique du terme, est ainsi limité aux valeurs positives de l'énergie E .

4.3.5 Puits infini

Considérons maintenant le problème à la fois simple et important du puits infini, correspondant à une particule de masse m libre de se mouvoir selon l'axe x entre deux murs infranchissables séparés par une distance L . Il est donc impossible d'observer la particule à l'extérieur de l'intervalle $[0, L]$, ce qui signifie que l'amplitude de probabilité $\psi(x)$ est nulle à l'extérieur de cet intervalle. Une façon simple d'obtenir ce comportement est de considérer que l'énergie potentielle $V(x)$ est nulle pour $x \in [0, L]$ et infinie à l'extérieur de cet intervalle. Sachant que $V(x) = 0$ pour $x \in [0, L]$, la fonction d'onde $\psi(x)$ associée à une valeur propre $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ obéit dans cet intervalle à l'éq. 4.61 obtenue plus haut dans le cas d'une particule libre. Au lieu de la base $\{\exp(ikx), \exp(-ikx)\}$ utilisée plus haut pour engendrer le sous-espace propre de dimension 2 associé à la valeur propre E , nous pouvons utiliser la base $\{\sin kx, \cos kx\}$, ce qui nous donne

$$\psi(x) = \alpha \sin kx + \beta \cos kx, \quad (4.66)$$

où α et β sont deux coefficients complexes quelconques. On retrouve bien un espace vectoriel de dimension 2 comme annoncé plus haut. L'équation de Schrödinger faisant intervenir la dérivée seconde de la fonction d'onde, cette dernière est nécessairement une fonction continue. Comme $\psi(x) = 0$ pour $x < 0$, on en déduit que $\psi(0) = 0$ et donc que $\beta = 0$. Par ailleurs, la fonction d'onde est nulle pour $x > L$, ce qui impose $\psi(L) = 0$ par continuité, et donc $\sin kL = 0$. On en déduit que la grandeur k doit être un multiple de π/L . Les valeurs possibles de k peuvent donc s'écrire

$$k_n = n \frac{\pi}{L}, \quad (4.67)$$

où n est un entier strictement positif. On en déduit les valeurs propres possible de l'Hamiltonien du puits infini :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}, \quad (4.68)$$

avec $n = 1, 2, 3, \dots$. Les fonctions propres associées à la valeur propre E_n sont de la forme $\alpha \sin k_n x$, ce qui signifie que l'espace propre des solutions physiquement acceptables est de dimension 1, et que la valeur propre E_n est donc non dégénérée. Afin de construire une fonction d'onde normée engendrant cet espace propre, il suffit d'écrire la condition de normalisation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = |\alpha|^2 \int_0^L \sin^2 k_n x dx = 1. \quad (4.69)$$

Sachant que $\psi_n(x)$ est une fonction périodique de période $2\pi/k_n = 2L/n$, on en déduit que la densité de probabilité, en $\sin^2 k_n x = (1 - \cos 2k_n x)/2$, présente une période deux fois plus petite, soit L/n . L'intégrale de la densité de probabilité est donc calculée sur n périodes, ce qui nous autorise à remplacer dans l'intégrale la fonction par sa valeur moyenne, soit $|\alpha|^2/2$. On en déduit que la condition de normalisation s'écrit $L|\alpha|^2/2 = 1$, soit $|\alpha|^2 = 2/L$. Le choix le plus simple

consiste à prendre α réel positif, soit $\alpha = \sqrt{2/L}$. On en déduit

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}. \quad (4.70)$$

La Fig. 4.2 représente les niveaux d'énergie $E_n = n^2 E_1$ pour un puits infini. Selon l'usage, chaque fonction propre est représentée en utilisant comme ligne de base la position du niveau d'énergie lui correspondant.

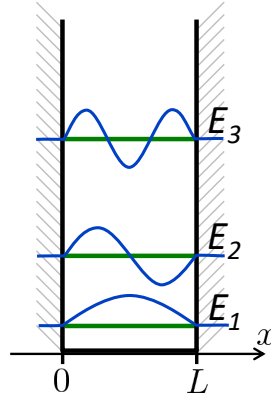


FIGURE 4.2 – Niveaux d'énergie dans un puits infini de largeur L .

On peut remarquer que les fonctions propres ainsi obtenues présentent une rupture de pente aux points $x = 0$ et $x = L$, et donc que la dérivée $d\psi/dx$ n'est pas continue en ces points. Ceci n'est pas surprenant car

$$\frac{d\psi}{dx}(0^+) - \frac{d\psi}{dx}(0^-) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{d\psi}{dx} \right]_{-\epsilon}^{+\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} (E - V(x)) \psi(x) dx, \quad (4.71)$$

où l'on a remplacé $d^2\psi/dx^2$ par son expression tirée de l'éq. 4.59. Lorsque $V(x)$ est une fonction finie, on voit que l'intégrale va tendre vers zéro lorsque ϵ tend vers zéro, ce qui implique que $d\psi/dx$ est une fonction continue en tout point de l'espace, de même bien entendu que la fonction d'onde $\psi(x)$. À l'inverse, lorsque $V(x)$ prend des valeurs infinies, comme ici en $x = 0$ et $x = L$, il est possible que la dérivée de la fonction d'onde soit discontinue, ce qui explique la rupture de pente observée pour les fonctions propres représentées Fig. 4.2. On retiendra donc le résultat suivant :

Continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée

Lorsque le potentiel est fini, la fonction propre $\psi(x)$ et sa dérivée $d\psi/dx$ sont des fonctions continues. Aux points où $V(x)$ est infini, la fonction $\psi(x)$ reste une fonction continue mais sa dérivée peut être discontinue.

On peut enfin remarquer que le spectre de l'Hamiltonien du puits infini est discret, puisque les valeurs propres $E_n = n^2 E_1$ constituent un ensemble dénombrable. Le théorème spectral nous permet donc d'écrire toute fonction d'onde prenant ses valeurs dans l'intervalle $[0, L]$ et s'annulant

aux bornes de l'intervalle sous la forme

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_n c_n \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad (4.72)$$

avec

$$c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle = \int \psi_n^*(x) \psi(x) dx = \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \sin \frac{n\pi x}{L} \psi(x) dx. \quad (4.73)$$

Une telle décomposition sur une base discrète n'est pas sans rappeler la décomposition d'une fonction périodique en séries de Fourier.

Nous venons de voir avec l'exemple du puits infini qu'une fonction d'onde continue $\psi(x)$ définie dans l'intervalle $[0, L]$ pouvait également se décomposer dans une base discrète. Ce résultat remarquable reste vrai pour une fonction d'onde $\psi(x)$ définie pour toute valeur de $x \in \mathbb{R}$. Une base discrète couramment utilisée est la base des fonctions de Hermite, qui se trouvent être les fonctions propres de l'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique que nous discuterons en 6.5. Comme représenté Fig. 4.3, on en déduit que le ket $|\psi\rangle$ décrivant l'état d'une particule ponctuelle peut être représenté de différentes manières : soit la fonction d'onde $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$, soit sa transformée de Fourier $\tilde{\psi}(p_x) = \langle p_x | \psi \rangle$, soit un vecteur colonne représentant la décomposition de $|\psi\rangle$ dans une base dénombrable.

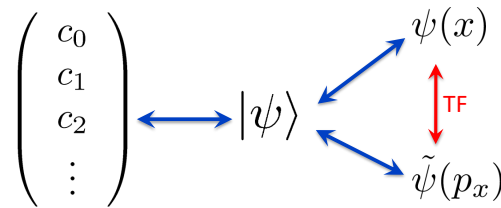


FIGURE 4.3 – Trois représentations possible du ket $|\psi\rangle$ décrivant l'état d'une particule ponctuelle.

4.4 Mouvement d'une particule ponctuelle à trois dimensions

Pour clore ce chapitre, nous allons généraliser les résultats établis plus haut au cas d'une particule pouvant se mouvoir dans un espace à trois dimensions. Comme il est possible de mesurer une telle particule en un point $\vec{r}$ quelconque de coordonnées x, y, z , nous pouvons introduire la base propre $|x, y, z\rangle$ associée à une mesure de position, pour $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$. En appelant $\hat{x}, \hat{y}$ et $\hat{z}$ les observables correspondantes, on pourra écrire

$$\hat{x} |x, y, z\rangle = x |x, y, z\rangle \quad (4.74)$$

$$\hat{y} |x, y, z\rangle = y |x, y, z\rangle \quad (4.75)$$

$$\hat{z} |x, y, z\rangle = z |x, y, z\rangle \quad (4.76)$$

Compte tenu de l'existence de cette base propre commune, les observables $\hat{x}, \hat{y}$, et $\hat{z}$ commutent évidemment entre elles. Elles constituent de fait un ECOC puisqu'une mesure des trois coordonnées du vecteur position de la particule permet de déterminer complètement son état. Il est ainsi possible

de décomposer l'état $|\psi\rangle$ de la particule dans la base continue $\{|x, y, z\rangle\}$ selon l'expression

$$|\psi\rangle = \iiint_{\mathbb{R}^3} |x, y, z\rangle \langle x, y, z|\psi\rangle dx dy dz = \iiint_{\mathbb{R}^3} \psi(x, y, z) |x, y, z\rangle dx dy dz, \quad (4.77)$$

où nous avons introduit la fonction d'onde

$$\psi(x, y, z) = \langle x, y, z|\psi\rangle, \quad (4.78)$$

appartenant à l'espace $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ des fonctions de carré sommable de $\mathbb{R}^3$ dans $\mathbb{C}$. On peut également utiliser la notation plus compacte $|\vec{r}\rangle = |x, y, z\rangle$, associée à la fonction d'onde $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\psi\rangle$. Cette notation vectorielle, au sens de l'espace vectoriel euclidien de dimension 3, peut également être utilisée pour des opérateurs. Par exemple, on peut considérer l'objet $\hat{\vec{r}}$, représentant en fait l'ensemble $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ des trois observables associées aux coordonnées de la particule. On dira ainsi que $\hat{\vec{r}}$ est l'observable position de la particule, puisque ses trois composantes déterminent complètement la position de la particule dans l'espace.

On peut de même considérer l'observable impulsion $\hat{\vec{p}}$ dont l'action dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ s'obtient à partir de l'éq. 4.36 en remplaçant la dérivée par rapport à x par des dérivées partielles par rapport à x, y ou z , soit

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (4.79)$$

On pourra encore écrire

$$\hat{\vec{p}}\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \hat{p}_x \\ \hat{p}_y \\ \hat{p}_z \end{pmatrix} \psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \partial\psi/\partial x \\ \partial\psi/\partial y \\ \partial\psi/\partial z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}\psi(\vec{r}). \quad (4.80)$$

On écrira de même $\hat{p}^2 = \hat{\vec{p}}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$, ce qui donne

$$\hat{p}^2\psi(\vec{r}) = -\hbar^2 \Delta\psi(\vec{r}). \quad (4.81)$$

Ces notations nous permettent de formuler l'équation de Schrödinger portant sur la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ d'une particule ponctuelle à 3D.

Mouvement à 3D

Pour une particule ponctuelle de masse m se déplaçant à trois dimensions dans un potentiel $V(\vec{r})$, la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r}|\psi\rangle$ obéit à l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial\psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r}, t) \quad (4.82)$$

où l'action de l'Hamiltonien $\hat{H}$ dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ s'écrit

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}). \quad (4.83)$$

Il est bien entendu possible de construire d'autres observables à partir des observables position et impulsion. Un exemple important est l'observable moment cinétique $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$, dont les composantes

cartésiennes s'écrivent

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \quad (4.84)$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \quad (4.85)$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \quad (4.86)$$

Il est remarquable que, contrairement aux observables position et impulsion, les composantes cartésiennes du moment cinétique ne commutent pas entre elle. On peut en effet écrire

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{L}_y] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{L}_y], \quad (4.87)$$

où on a utilisé la bilinéarité du commutateur. Le premier terme s'écrit

$$[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{L}_y] = [\hat{y}, \hat{L}_y]\hat{p}_z + \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{L}_y] = \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{L}_y], \quad (4.88)$$

où on a utilisé l'éq. 3.105 puis remarqué que $\hat{y}$ et $\hat{L}_y$ commutent car ce dernier opérateur n'agit que sur les variables x et z . On peut ensuite écrire

$$[\hat{p}_z, \hat{L}_y] = [\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = [\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x = -i\hbar\hat{p}_x, \quad (4.89)$$

d'où l'on déduit $[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{L}_y] = -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x$. On a de même

$$[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{L}_y] = [\hat{z}, \hat{L}_y]\hat{p}_y = [\hat{z}, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z]\hat{p}_y = -\hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y = -i\hbar\hat{x}\hat{p}_y. \quad (4.90)$$

On en déduit

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x), \quad (4.91)$$

soit

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z. \quad (4.92)$$

Par permutation circulaire on en déduit les deux autres relations $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$ et $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$. Les composantes cartésiennes du moment cinétique ne pourront donc pas être mesurées simultanément.

Chapitre 5

Transformation de Fourier

Comme discuté au chapitre précédent, les amplitudes de probabilité de la position x et de l'impulsion p_x d'une particule sont reliées par transformée de Fourier. Au-delà de ce problème spécifique de mécanique quantique, la transformation de Fourier, que nous allons étudier en détail dans ce chapitre, est un outil extrêmement utile en physique et en traitement du signal.

5.1 Transformée de Fourier et transformée de Fourier inverse

5.1.1 Définition

La transformée de Fourier d'une fonction $f(x)$ de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{C}$ est définie par

$$\tilde{f}(k) = \mathcal{F}[f(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx. \quad (5.1)$$

On peut alors calculer

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x') e^{-ikx'} dx' \right) dk \quad (5.2)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x') \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x')} dk \right) dx' \quad (5.3)$$

$$= \sqrt{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x') \delta(x - x') dx' \quad (5.4)$$

$$= \sqrt{2\pi} f(x) \quad (5.5)$$

où, à l'aide de l'éq. A.41, nous avons remplacé l'expression entre parenthèses figurant dans l'éq. 5.3 par $2\pi\delta(x-x')$. Ceci nous permet d'exprimer $f(x)$ en fonction de $\tilde{f}(k)$ à l'aide d'une relation appelée transformée de Fourier inverse et définie par

$$f(x) = \mathcal{F}^{-1}[\tilde{f}(k)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk. \quad (5.6)$$

Le facteur 2π peut-être réparti différemment selon les ouvrages, le choix privilégié ici présentant l'avantage de la symétrie entre transformée de Fourier et transformée de Fourier inverse, qui ne diffèrent ainsi que par le signe de la phase dans l'exponentielle complexe. Si la variable x correspond

à la position, alors la grandeur k correspond au vecteur d'onde. L'éq. 5.6 peut ainsi s'interpréter en disant que toute fonction de x peut s'écrire comme une superposition d'ondes planes associées à une distribution de vecteurs d'onde k , la fonction $\tilde{f}(k)$ représentant l'amplitude complexe associée à chaque onde plane $\exp(ikx)$. Dans le cas du mouvement d'une particule ponctuelle en mécanique quantique, une telle superposition d'ondes planes est appelée un *paquet d'ondes*.

Dans ce cours de physique quantique, nous préférons considérer la variable $p = \hbar k$ représentant l'impulsion d'une particule se déplaçant selon l'axe x . On utilisera donc des versions modifiées de la transformée de Fourier et de la transformée de Fourier inverse, obtenues en remplaçant k par $p/\hbar$. Il faudra également remplacer le préfacteur $1/\sqrt{2\pi}$ par $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ suite aux changements de variable à effectuer dans les intégrales (et toujours en privilégiant une convention symétrique entre transformée de Fourier et transformée de Fourier inverse). On obtient ainsi les définitions suivantes :

Transformation de Fourier

La transformée de Fourier d'une fonction d'onde $\psi(x)$ s'écrit

$$\tilde{\psi}(p) = \mathcal{F}[\psi(x)](p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) \exp\left(-i\frac{px}{\hbar}\right) dx. \quad (5.7)$$

La transformée de Fourier inverse s'écrit alors

$$\psi(x) = \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\psi}(p)](x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(p) \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right) dp. \quad (5.8)$$

Ce sont ces définitions de la transformée de Fourier que nous utiliserons dans la suite du cours. Pour alléger les notations, tout au long de ce chapitre nous omettrons l'indice x de l'impulsion p_x ainsi que les bornes des intégrales, qui porteront toutes sur l'ensemble de $\mathbb{R}$. Comme discuté au chapitre précédent, $\psi(x)$ et $\tilde{\psi}(p)$ représentent les amplitudes de probabilité respectivement associées à la position et à l'impulsion de notre particule, de sorte que les fonctions $|\psi(x)|^2$ et $|\tilde{\psi}(p)|^2$ représentent les densités de probabilité associées respectivement à la position et à l'impulsion. De plus, la fonction d'onde $\psi(x) = \langle x|\psi \rangle$ et sa transformée de Fourier $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi \rangle$ correspondent simplement à deux représentations d'un même ket $|\psi \rangle$ dans deux bases continues, d'une part la base $\{|x\rangle\}$ des fonctions propres de l'opérateur position $\hat{x}$ et d'autre part la base $\{|p\rangle\}$ des fonctions propres de l'opérateur impulsion $\hat{p}$. On dira encore que $\psi(x)$ représente l'état du système dans l'espace direct tandis que $\tilde{\psi}(p)$ représente l'état de ce même système dans l'espace de Fourier. La transformation de Fourier correspond donc à un simple changement de base, la matrice de changement de base pouvant s'obtenir à l'aide de la fonction d'onde de l'onde plane

$$\langle x|p \rangle = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (5.9)$$

ainsi que du complexe conjugué $\langle p|x \rangle = e^{-ipx/\hbar}/\sqrt{2\pi\hbar}$. Dans le cadre du formalisme de Dirac, l'éq. 5.7 s'obtient ainsi directement à l'aide de la relation de fermeture selon l'expression

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi \rangle = \langle p| \left(\int |x\rangle \langle x| dx \right) |\psi \rangle = \int \langle p|x \rangle \langle x|\psi \rangle dx = \int \frac{e^{-ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x) dx. \quad (5.10)$$

On obtient de même l'éq. 5.8 en écrivant

$$\psi(x) = \langle x|\psi \rangle = \langle x| \left(\int |p\rangle \langle p| dp \right) |\psi \rangle = \int \langle x|p\rangle \langle p|\psi \rangle dp = \int \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{\psi}(p) dp. \quad (5.11)$$

Le formalisme de Dirac permettra donc de retrouver, parfois plus simplement, la plupart des résultats que nous allons établir plus loin dans le cadre de l'analyse de Fourier.

5.1.2 Propriétés

Le succès de la transformation de Fourier résulte de ses propriétés remarquables, dont les principales sont résumées ci-dessous.

Théorème de Parseval-Plancherel

Etant données deux fonctions $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ ainsi que leurs transformées de Fourier respectives $\tilde{\psi}_1(p)$ et $\tilde{\psi}_2(p)$, alors on peut écrire

$$\int \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx = \int \tilde{\psi}_1^*(p) \tilde{\psi}_2(p) dp. \quad (5.12)$$

Pour démontrer ce théorème, il suffit d'exprimer une des deux fonctions à l'aide de sa transformée de Fourier, ce qui fait automatiquement apparaître la transformée de Fourier de l'autre fonction :

$$\int \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \iint \psi_1^*(x) \tilde{\psi}_2(p) e^{ipx/\hbar} dp dx \quad (5.13)$$

$$= \int \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi_1(x) e^{-ipx/\hbar} dx \right)^* \tilde{\psi}_2(p) dp \quad (5.14)$$

$$= \int \tilde{\psi}_1^*(p) \tilde{\psi}_2(p) dp. \quad (5.15)$$

On peut interpréter le théorème de Parseval-Plancherel en remarquant que le membre de gauche de l'éq. 5.12 correspond au produit scalaire hermitien des deux fonctions $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$, tandis que le membre de droite correspond au produit scalaire hermitien de leurs transformées de Fourier $\tilde{\psi}_1(p)$ et $\tilde{\psi}_2(p)$. La transformation de Fourier, conservant le produit scalaire hermitien, est donc une isométrie. Un tel résultat est immédiat dans le cadre du formalisme de Dirac et peut simplement s'écrire

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \langle \psi_1 | x \rangle \langle x | \psi_2 \rangle dx = \int \langle \psi_1 | p \rangle \langle p | \psi_2 \rangle dp. \quad (5.16)$$

Par ailleurs, en dérivant l'éq. 5.8 par rapport à x , on obtient

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(p) \frac{ip}{\hbar} \exp(ipx/\hbar) dp. \quad (5.17)$$

En comparant le membre de droite à la définition de la transformée de Fourier inverse, on voit qu'une dérivation dans l'espace direct revient à multiplier par $ip/\hbar$ dans l'espace de Fourier.

Dérivation et transformée de Fourier

La fonction $\tilde{\psi}(p)$ étant définie comme la transformée de Fourier de $\psi(x)$, dériver $\psi(x)$ par rapport à x revient simplement à multiplier la transformée de Fourier par $ip/\hbar$, soit

$$\mathcal{F} \frac{d\psi}{dx} = \frac{ip}{\hbar} \tilde{\psi}(p) = \frac{ip}{\hbar} \mathcal{F}\psi(x). \quad (5.18)$$

On peut généraliser à une dérivée multiple d'ordre n selon l'expression

$$\mathcal{F} \frac{d^n \psi}{dx^n} = \left(\frac{ip}{\hbar} \right)^n \tilde{\psi}(p) = \left(\frac{ip}{\hbar} \right)^n \mathcal{F}\psi(x). \quad (5.19)$$

Ce résultat sera naturellement très utile pour résoudre toute équation différentielle portant sur la fonction $\psi(x)$, puisqu'une dérivation dans l'espace direct se ramène à une simple multiplication dans l'espace de Fourier. On obtient évidemment un résultat similaire pour la transformée de Fourier inverse, en prenant simplement en compte le changement de signe de la phase.

Dérivation et transformée de Fourier inverse

La fonction $\tilde{\psi}(p)$ étant définie comme la transformée de Fourier de $\psi(x)$, dériver $\tilde{\psi}(p)$ par rapport à p revient simplement à multiplier la transformée de Fourier inverse par $-ix/\hbar$, soit

$$\mathcal{F}^{-1} \frac{d\tilde{\psi}}{dp} = -\frac{ix}{\hbar} \psi(x) = -\frac{ix}{\hbar} \mathcal{F}^{-1} \tilde{\psi}(p). \quad (5.20)$$

On peut généraliser à une dérivée multiple d'ordre n selon l'expression

$$\mathcal{F}^{-1} \frac{d^n \tilde{\psi}}{dp^n} = \left(-\frac{ix}{\hbar} \right)^n \psi(x) = \left(-\frac{ix}{\hbar} \right)^n \mathcal{F}^{-1} \tilde{\psi}(p). \quad (5.21)$$

Les relations ci-dessus permettent de retrouver où d'établir l'action des opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}$ sur la fonction d'onde exprimée dans l'espace direct ou dans l'espace de Fourier. En effet, on sait que $\langle p | \hat{p} | \psi \rangle = p \langle p | \psi \rangle = p \psi(p)$ car $|p\rangle$ est vecteur propre de $\hat{p}$ pour la valeur propre p . La quantité $\langle x | \hat{p} | \psi \rangle$ étant par définition la transformée de Fourier inverse de $\langle p | \hat{p} | \psi \rangle$, on en déduit

$$\hat{p}\psi(x) = \mathcal{F}^{-1} p \tilde{\psi}(p). \quad (5.22)$$

La transformée de Fourier inverse de l'éq. 5.18 nous permet ainsi de retrouver l'expression

$$\hat{p}\psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(x)}{dx}, \quad (5.23)$$

déjà établie au chapitre précédent. De même, la transformée de Fourier de l'éq. 5.20 nous donne

$$\frac{d\tilde{\psi}}{dp} = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{F}(x\psi(x)) = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{F}\langle x | \hat{x} | \psi \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle p | \hat{x} | \psi \rangle. \quad (5.24)$$

Ce résultat nous permet d'écrire

$$\hat{x}\tilde{\psi}(p) = i\hbar \frac{d\tilde{\psi}(p)}{dp}. \quad (5.25)$$

Au signe près, on retrouve la symétrie déjà évoquée en 4.2.4 entre position et impulsion : dans

l'espace des positions, l'opérateur $\hat{x}$ correspond à une simple multiplication par x tandis que l'opérateur $\hat{p} = (\hbar/i)d/dx$ est associé à une dérivée première par rapport à x . De même, dans l'espace des impulsions, l'opérateur $\hat{p}$ correspond à une simple multiplication par p tandis que l'opérateur $\hat{x} = i\hbar d/dp$ est associé à une dérivée première par rapport à p .

Considérons maintenant l'effet d'une translation de la fonction d'onde sur sa transformée de Fourier. Pour cela, remplaçons x par $x - x_0$ dans l'éq. 5.8, ce qui nous donne

$$\psi(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(p) e^{ip(x-x_0)/\hbar} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int [\tilde{\psi}(p) e^{-ipx_0/\hbar}] e^{ipx/\hbar} dx. \quad (5.26)$$

En procédant par identification, on en déduit que la transformée de Fourier de $\psi(x - x_0)$ n'est autre que $\tilde{\psi}(p) \exp(-ipx_0/\hbar)$, d'où l'on déduit les relations suivantes :

Effet d'une translation

$$\mathcal{F}\psi(x - x_0) = \tilde{\psi}(p) e^{-ipx_0/\hbar} \quad (5.27)$$

$$\mathcal{F}^{-1}\tilde{\psi}(p - p_0) = \psi(x) e^{ip_0x/\hbar} \quad (5.28)$$

Une translation dans un espace se traduit donc par un facteur de phase linéaire dans l'espace conjugué par transformée de Fourier. Considérons enfin le produit de convolution $[\psi_1 * \psi_2](x)$, noté plus simplement $\psi_1(x) * \psi_2(x)$ et défini par l'expression

$$\psi_1(x) * \psi_2(x) = \int \psi_1(x') \psi_2(x - x') dx' = \int \psi_1(x - x') \psi_2(x') dx', \quad (5.29)$$

où l'on a effectué le changement de variable $x' \rightarrow x - x'$ dans la seconde intégrale afin de mettre en évidence la commutativité du produit de convolution. La transformée de Fourier du produit de convolution s'écrit

$$\mathcal{F}[(\psi_1 * \psi_2)(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \iint \psi_1(x') \psi_2(x - x') e^{-ipx/\hbar} dx dx' \quad (5.30)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \iint \psi_1(x') e^{-ipx'/\hbar} \psi_2(x - x') e^{-ip(x-x')/\hbar} dx dx' \quad (5.31)$$

$$= \int \psi_1(x') e^{-ipx'/\hbar} dx' \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi_2(x'') e^{-ipx''/\hbar} dx'' \quad (5.32)$$

$$= \sqrt{2\pi\hbar} \tilde{\psi}_1(p) \tilde{\psi}_2(p), \quad (5.33)$$

ce qui nous donne un simple produit dans l'espace de Fourier. On en déduit donc les relations suivantes :

Transformée de Fourier d'un produit

$$\mathcal{F}\psi_1(x) \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{\psi}_1(p) * \tilde{\psi}_2(p) \quad (5.34)$$

$$\mathcal{F}^{-1}\tilde{\psi}_1(p) \tilde{\psi}_2(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi_1(x) * \psi_2(x) \quad (5.35)$$

5.2 Inégalité de Heisenberg

L'un des résultats les plus fameux de la physique quantique est l'inégalité de Heisenberg, qui impose une borne inférieure au produit $\Delta x \Delta p$ des écarts types de la position et de l'impulsion d'une particule. Comme déjà évoqué en 4.2.5, les observables $\hat{x}$ et $\hat{p}$ sont effectivement des observables incompatibles puisque leur commutateur $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \hat{I}$ est non nul (voir éq. 4.51). Bien que cette borne inférieure puisse être déterminée dans le strict cadre de l'analyse de Fourier, nous préférons établir au préalable un résultat appelé inégalité de Heisenberg généralisée qui s'applique à deux observables quelconques $\hat{A}$ et $\hat{B}$, avant de revenir ensuite au cas des observables position et impulsion.

5.2.1 Inégalité de Cauchy Schwartz

Le point de départ de la démonstration de l'inégalité de Heisenberg repose sur l'inégalité de Cauchy-Schwartz, valable dans tout espace de Hilbert. Celle-ci stipule que, pour tous kets $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$, le module du produit scalaire hermitien entre ces deux kets est inférieur ou égal au produit de leurs normes. En élevant au carré, on peut formuler cette inégalité sous la forme

$$|\langle\psi|\psi'\rangle|^2 \leq \langle\psi|\psi\rangle \langle\psi'|\psi'\rangle. \quad (5.36)$$

Pour établir ce résultat, appelons ϕ l'argument du nombre complexe $\langle\psi|\psi'\rangle$ (ce qui revient à poser $\langle\psi|\psi'\rangle = e^{i\phi} |\langle\psi|\psi'\rangle|$), puis considérons la fonction du nombre réel λ définie par

$$f(\lambda) = \| |\psi\rangle + \lambda e^{-i\phi} |\psi'\rangle \|^2. \quad (5.37)$$

À l'évidence, la grandeur $f(\lambda)$ est positive ou nulle. Or on peut écrire cette fonction sous la forme

$$f(\lambda) = \left(\langle\psi| + \lambda e^{i\phi} \langle\psi'| \right) \left(|\psi\rangle + \lambda e^{-i\phi} |\psi'\rangle \right) \quad (5.38)$$

$$= \langle\psi'|\psi'\rangle \lambda^2 + \left(\langle\psi|\psi'\rangle e^{-i\phi} + \langle\psi'|\psi\rangle e^{i\phi} \right) \lambda + \langle\psi|\psi\rangle \quad (5.39)$$

$$= \langle\psi'|\psi'\rangle \lambda^2 + 2|\langle\psi|\psi'\rangle| \lambda + \langle\psi|\psi\rangle. \quad (5.40)$$

On obtient ainsi un polynôme du second degré à coefficients réels et de courbure positive (car $\langle\psi'|\psi'\rangle$ est positif). Sachant que $f(\lambda) \geq 0$, il est impossible que l'équation du second degré $f(\lambda) = 0$ admette deux racines distinctes (entre lesquelles $f(\lambda)$ serait négatif), ce qui impose que son discriminant soit négatif ou nul. En écrivant cette condition pour le discriminant réduit, on obtient

$$|\langle\psi|\psi'\rangle|^2 - \langle\psi|\psi\rangle \langle\psi'|\psi'\rangle \leq 0, \quad (5.41)$$

ce qui nous permet bien d'en déduire l'éq. 5.36 et achève donc la démonstration de l'inégalité de Cauchy-Schwartz.

Remarquons que dans le cas limite où $|\langle\psi|\psi'\rangle|^2 = \langle\psi|\psi\rangle \langle\psi'|\psi'\rangle$, le discriminant est nul ce qui signifie que l'équation du second degré $f(\lambda) = 0$ admet une racine double donnée par

$$\lambda = -\frac{|\langle\psi|\psi'\rangle|}{\langle\psi'|\psi'\rangle}. \quad (5.42)$$

En remplaçant λ par son expression dans $f(\lambda) = 0$, soit $|\psi\rangle + \lambda e^{-i\phi} |\psi'\rangle = 0$, on obtient

$$|\psi\rangle - \frac{|\langle\psi|\psi'\rangle|}{\langle\psi'|\psi'\rangle} e^{-i\phi} |\psi'\rangle = 0, \quad (5.43)$$

soit

$$|\psi\rangle = \frac{|\langle\psi|\psi'\rangle|}{\langle\psi'|\psi'\rangle} e^{-i\phi} |\psi'\rangle = \frac{\langle\psi'|\psi\rangle}{\langle\psi'|\psi'\rangle} |\psi'\rangle, \quad (5.44)$$

ce qui signifie tout simplement que $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$ sont colinéaires. La réciproque est évidemment vérifiée, donc on peut en conclure que l'inégalité de Cauchy-Schwartz devient une égalité si et seulement si les deux vecteurs considérés sont colinéaires.

5.2.2 Inégalité de Heisenberg généralisée

Considérons un système placé dans l'état $|\psi\rangle$ et cherchons à minorer le produit $\langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle$ des carrés des moyennes de deux observables arbitraires $\hat{A}$ et $\hat{B}$. En appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwartz (éq. 5.36) aux vecteurs $\hat{A}|\psi\rangle$ et $\hat{B}|\psi\rangle$, on obtient

$$\langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle = \langle \psi | \hat{A} \hat{A} | \psi \rangle \langle \psi | \hat{B} \hat{B} | \psi \rangle \geq \left| \langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle \right|^2. \quad (5.45)$$

Pour évaluer la grandeur complexe $\langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle$, calculons ses parties réelles et imaginaires. On a

$$2 \operatorname{Re} \langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{B} \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \{ \hat{A}, \hat{B} \} | \psi \rangle. \quad (5.46)$$

où $\{ \hat{A}, \hat{B} \} = \hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A}$ est par définition l'*anticommutateur* des opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$. Remarquons que l'anticommutateur de deux opérateurs hermitiens est un opérateur hermitien car $\{ \hat{A}, \hat{B} \}^\dagger = \hat{B} \hat{A} + \hat{A} \hat{B} = \{ \hat{A}, \hat{B} \}$. Il n'est donc pas surprenant que sa valeur moyenne soit un nombre réel. On a par ailleurs

$$2 \operatorname{Im} \langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle = \frac{1}{i} \left(\langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{B} \hat{A} | \psi \rangle \right) = -i \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle. \quad (5.47)$$

Remarquons que $[\hat{A}, \hat{B}]$ est un opérateur anti-hermitien (*i.e.* opposé à son adjoint), car $[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = \hat{B} \hat{A} - \hat{A} \hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}]$. Il n'est donc pas surprenant que la valeur moyenne de l'opérateur hermitien $-i[\hat{A}, \hat{B}]$ soit réelle, ce qui revient à dire que la valeur moyenne de l'opérateur anti-hermitien $[\hat{A}, \hat{B}]$ est un nombre imaginaire pur. En écrivant le carré du module de $\langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle$ comme la somme des carrés de ses parties réelles et imaginaires, on obtient

$$\left| \langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle \right|^2 = \frac{1}{4} \left(\langle \psi | \{ \hat{A}, \hat{B} \} | \psi \rangle \right)^2 + \frac{1}{4} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2. \quad (5.48)$$

Le membre de droite étant la somme de deux nombres positifs ou nuls, il est minoré par le second terme, ce qui nous donne l'inégalité

$$\left| \langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle \right|^2 \geq \frac{1}{4} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2. \quad (5.49)$$

En combinant cette dernière inégalité avec l'éq. 5.45, on en déduit l'inégalité

$$\langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2. \quad (5.50)$$

Pour terminer la démonstration, introduisons les observables $\hat{A}' = \hat{A} - \langle A \rangle \hat{I}$ et $\hat{B}' = \hat{B} - \langle B \rangle \hat{I}$, où $\hat{I}$ est l'identité. On a évidemment $\langle A' \rangle = \langle A \rangle - \langle A \rangle = 0$, ainsi que $\langle B' \rangle = 0$, raison pour laquelle ces deux nouvelles observables peuvent être considérées comme des versions recentrées sur les valeurs moyennes des observables initiales $\hat{A}$ et $\hat{B}$. Le changement d'origine ne change évidemment pas le commutateur, car l'identité commute avec tout autre opérateur :

$$[\hat{A}', \hat{B}'] = [\hat{A} - \langle A \rangle \hat{I}, \hat{B} - \langle B \rangle \hat{I}] = [\hat{A}, \hat{B}] - [\langle A \rangle \hat{I}, \hat{B}] - [\hat{A}, \langle B \rangle \hat{I}] + [\langle A \rangle \hat{I}, \langle B \rangle \hat{I}] = [\hat{A}, \hat{B}]. \quad (5.51)$$

On peut enfin écrire

$$\langle A'^2 \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - 2\langle \langle A \rangle A \rangle + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \Delta A^2. \quad (5.52)$$

On retrouve ici les deux définitions possibles de la variance : soit la différence entre la moyenne du carré et le carré de la moyenne, soit la moyenne du carré de l'écart à la valeur moyenne. On a évidemment le même résultat avec la grandeur B , soit $\Delta B^2 = \langle \psi | \hat{B}'^2 | \psi \rangle$. En appliquant l'éq. 5.50 aux observables recentrées $\hat{A}'$ et $\hat{B}'$, on en déduit

$$\Delta A^2 \Delta B^2 = \langle A'^2 \rangle \langle B'^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \left| \langle \psi | [\hat{A}', \hat{B}'] | \psi \rangle \right|^2 = \frac{1}{4} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2. \quad (5.53)$$

En prenant la racine carrée de cette inégalité, on obtient l'inégalité $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|$, appelée inégalité de Heisenberg généralisée, ou parfois simplement inégalité de Heisenberg.

Inégalité de Heisenberg

Le produit des écarts types de deux observables $\hat{A}$ et $\hat{B}$ est contraint par l'inégalité

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|. \quad (5.54)$$

On dit que l'inégalité est saturée lorsqu'elle devient une égalité, condition qui se produit si et seulement s'il existe un nombre réel λ tel que

$$(\hat{B} - \langle B \rangle) | \psi \rangle = i\lambda (\hat{A} - \langle A \rangle) | \psi \rangle. \quad (5.55)$$

En effet, pour que l'inégalité de Heisenberg soit saturée, il faut d'une part que l'inégalité de Cauchy-Schwartz soit saturée et d'autre part que l'éq. 5.49 appliquée aux observables $\hat{A}'$ et $\hat{B}'$ soit une égalité, ce qui, d'après l'éq. 5.48, impose $\langle \psi | \{\hat{A}', \hat{B}'\} | \psi \rangle = 0$. D'après ce que nous avons vu en 5.2.1, la première de ces deux conditions implique qu'il existe un nombre complexe α tel que $\hat{B}' | \psi \rangle = \alpha \hat{A}' | \psi \rangle$. La moyenne de l'anticommutateur devient alors

$$\langle \psi | \{\hat{A}', \hat{B}'\} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}' \hat{B}' | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{B}' \hat{A}' | \psi \rangle \quad (5.56)$$

$$= \langle \psi | \hat{A}' \alpha \hat{A}' | \psi \rangle + \langle \psi | \alpha^* \hat{A}' \hat{A}' | \psi \rangle \quad (5.57)$$

$$= (\alpha + \alpha^*) \langle A'^2 \rangle. \quad (5.58)$$

Si on excepte le cas trivial $\Delta A = 0$, la grandeur ci-dessus ne peut s'annuler que si le nombre α est imaginaire pur, ce qu'on peut reformuler en disant qu'il existe un nombre réel λ tel que

$\hat{B}'|\psi\rangle = i\lambda\hat{A}'|\psi\rangle$, ce qui nous permet d'établir l'éq. 5.55. Inversement, il est facile de vérifier que si cette dernière condition est vérifiée alors l'inégalité de Heisenberg est saturée.

En pratique, l'inégalité de Heisenberg peut s'interpréter de la manière suivante. Préparons le système de manière reproductible un grand nombre N de fois dans l'état $|\psi\rangle$ et mesurons $N/2$ fois la grandeur A , et $N/2$ fois la grandeur B . On obtient alors deux histogrammes de valeurs mesurées nous permettant de déterminer les valeurs moyennes $\langle A \rangle$ et $\langle B \rangle$ ainsi que les écarts types ΔA et ΔB . A la limite où N est suffisamment grand, le produit $\Delta A \Delta B$ sera contraint par l'inégalité donnée par l'éq. 5.54. Lorsque le commutateur est non nul, il ne sera donc pas possible de connaître simultanément les grandeurs incompatibles A et B .

5.2.3 Inégalité de Heisenberg pour la position et l'impulsion

Appliquons maintenant l'inégalité de Heisenberg généralisée aux observables position $\hat{x}$ et impulsion $\hat{p}$. Sachant que le commutateur $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\hat{I}$ est proportionnel à l'identité, la borne inférieure apparaissant dans l'inégalité est indépendante de l'état considéré et prend simplement la valeur $\hbar/2$. On en déduit l'inégalité historiquement établie en 1927 par Heisenberg

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.59)$$

Il est donc impossible de déterminer simultanément la position et l'impulsion d'une particule en deça d'une certaine limite de précision fixée par la constante de Planck.

Cherchons maintenant à quelle condition un paquet d'ondes peut saturer l'inégalité de Heisenberg, en commençant par le cas particulier d'un état $|\psi_0\rangle$ centré, ce qui correspond à $\langle x \rangle = 0$ et $\langle p \rangle = 0$. Si l'inégalité de Heisenberg est saturée, soit $\Delta x \Delta p = \hbar/2$, on sait d'après les résultats établis plus haut qu'il existe un nombre réel λ tel que $\hat{p}|\psi_0\rangle = i\lambda\hat{x}|\psi_0\rangle$. En remplaçant l'observable $\hat{p}$ par l'opérateur différentiel qui lui correspond dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, on obtient alors l'équation différentielle

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi_0}{dx} = i\lambda x \psi_0(x), \quad (5.60)$$

que l'on peut encore écrire

$$\frac{d\psi_0}{dx} + \frac{\lambda}{\hbar} x \psi_0(x) = 0. \quad (5.61)$$

Il s'agit d'une équation différentielle du premier ordre, admettant donc une solution unique à un facteur multiplicatif près. Cette équation est l'équation génératrice des gaussiennes (voir annexe A.4) qui admet la solution normalisée

$$\psi_0(x) = \frac{1}{(2\pi\Delta x^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\Delta x^2}\right), \quad (5.62)$$

où

$$\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle = \int x^2 |\psi_0(x)|^2 dx \quad (5.63)$$

est la variance associée. Au-delà du cas particulier d'un état centré, on peut obtenir la forme générale d'un état saturant l'inégalité de Heisenberg en translatant $|\psi_0\rangle$ successivement dans l'espace des impulsions puis dans l'espace des positions. Commençons par définir l'état $|\psi_1\rangle$ défini comme résultant

d'une translation de l'état $|\psi_0\rangle$ dans l'espace de Fourier d'une quantité p_0 , soit $\tilde{\psi}_1(p) = \tilde{\psi}_0(p - p_0)$, de sorte que $\langle\psi_1|\hat{p}|\psi_1\rangle = p_0$. D'après l'éq. 5.28, on peut en déduire $\psi_1(x) = \psi_0(x) \exp(ip_0x/\hbar)$. Effectuons ensuite une translation dans l'espace direct pour obtenir un état $|\psi\rangle$ centré sur une position $x_0 = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle$ arbitraire. Pour cela, il suffit d'écrire

$$\psi(x) = \psi_1(x - x_0) = \psi_0(x - x_0) e^{ip_0(x-x_0)/\hbar}. \quad (5.64)$$

On en déduit la forme générale d'un paquet d'ondes saturant l'inégalité de Heisenberg, appelé *paquet d'ondes minimal* :

$$\psi(x) = e^{ip_0(x-x_0)/\hbar} \psi_0(x - x_0) = \frac{e^{ip_0(x-x_0)/\hbar}}{(2\pi\Delta x^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\Delta x^2}\right). \quad (5.65)$$

Il s'agit d'une fonction gaussienne associée à une densité de probabilité d'écart type Δx , centrée au point x_0 et affectée d'une porteuse $e^{ip_0x/\hbar}$ donnant au paquet d'ondes son impulsion moyenne $\langle p \rangle = p_0$. Le facteur de phase $e^{-ip_0x_0/\hbar}$ n'est pas essentiel, et correspond simplement à un choix d'origine de phase au sommet du paquet d'ondes. On peut encore interpréter la fonction $\psi(x)$ comme une onde plane $e^{ip_0x/\hbar}$ multipliée par une enveloppe gaussienne. À l'inverse de l'onde plane – qui n'est pas une fonction d'onde physiquement acceptable – la fonction $\psi(x)$ est normalisée. Elle correspond à une bonne approximation d'une onde plane d'impulsion p_0 lorsque Δp est très petit (et Δx très grand).

Remarquons que, selon l'annexe A.4, la transformée de Fourier d'une gaussienne est encore une gaussienne, de sorte que la représentation de l'état dans l'espace de Fourier prend la forme très similaire

$$\tilde{\psi}(p) = e^{-ipx_0/\hbar} \left(\frac{2\Delta x^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\Delta x^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2\right). \quad (5.66)$$

Il s'agit également d'une fonction gaussienne, centrée sur l'impulsion moyenne p_0 . Les fonctions $\psi(x)$ et $\tilde{\psi}(p)$ sont représentées Fig. 5.1 dans le cas où $x_0 = 0$.

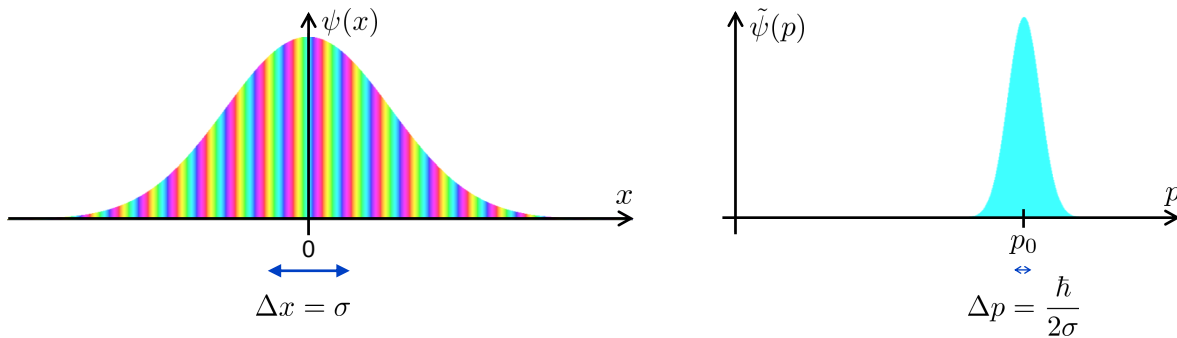


FIGURE 5.1 – Fonction d'onde $\psi(x)$ gaussienne (à gauche) et sa transformée de Fourier $\tilde{\psi}(p)$ (à droite) définies respectivement selon les éq. 5.65 et 5.66. La phase est représentée à l'aide du même code couleur que pour la Fig. 1.1.

Il est intéressant d'interpréter l'ordre de grandeur du produit $\Delta x \Delta p$ en considérant $\psi(x)$ comme une superposition d'ondes planes d'impulsions p , chaque onde plane étant affectée d'une amplitude $\tilde{\psi}(p)$. En $x = x_0$, ces ondes planes $\exp(ip(x-x_0)/\hbar)$ sont toutes en phase et vont donc interférer constructivement, donnant lieu au maximum observé au sommet du paquet d'ondes. Mais si on

s'éloigne de l'origine, les différentes ondes planes constituant le paquet d'ondes seront déphasées les unes par rapport aux autres et vont donc interférer destructivement, ce qui explique la décroissance de l'enveloppe du paquet d'ondes. Plus Δp sera grand et plus cette décroissance sera rapide, ce qui explique que Δx soit inversement proportionnel à Δp . En termes d'ordres de grandeur, on peut considérer que l'atténuation de l'enveloppe quand on se décale d'une quantité Δx par rapport au centre du paquet d'ondes sera notable lorsque la phase des ondes de de Broglie (en $px/\hbar$) devient de l'ordre de π , provoquant des interférences destructives entre les composantes du paquet d'ondes. On obtient ainsi la relation $\Delta x \Delta p / \hbar \sim \pi$, soit $\Delta x \Delta p \sim \pi \hbar$, ce qui nous donne le bon ordre de grandeur (à un facteur 2π près).

5.3 Mouvement d'une particule libre

L'impulsion p d'une particule classique étant reliée à sa vitesse par la relation $v = p/m$, on peut s'attendre à ce que les différentes composantes d'amplitudes $\tilde{\psi}(p)$ constituant un paquet d'ondes ne se déplacent pas à la même vitesse, ce qui va donner lieu à une déformation du paquet d'ondes au cours du temps. C'est ce problème que nous allons considérer dans cette partie, en nous intéressant dans un premier temps au cas d'une particule libre décrite par l'état $|\psi(t)\rangle$ correspondant à la fonction d'onde $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$.

5.3.1 Résolution de l'équation de Schrödinger

Joseph Fourier a développé la transformation qui porte son nom dans le cadre de ses recherches sur la propagation de la chaleur dans les solides. Il cherchait à résoudre l'équation de la chaleur, qui relie la dérivée première de la température à son Laplacien, soit une forme très similaire à celle de notre équation de Schrödinger pour une particule libre,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}, \quad (5.67)$$

obtenue en remplaçant $V(x)$ par 0 dans l'éq. 4.58. Pour écrire cette équation dans l'espace de Fourier, il suffit d'après l'éq. 5.19 de remplacer $\partial^2/\partial x^2$ par $-p^2/\hbar^2$, ce qui donne

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}(p, t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(p, t). \quad (5.68)$$

On obtient une équation différentielle du premier ordre à coefficients constants, dont la solution s'écrit immédiatement sous forme de l'exponentielle

$$\tilde{\psi}(p, t) = \tilde{\psi}(p, 0) \exp\left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t\right). \quad (5.69)$$

Dans l'espace de Fourier, l'évolution temporelle se manifeste donc simplement par un facteur de phase, $\phi(p, t) = -p^2 t / (2m\hbar)$, proportionnel au temps et au carré de l'impulsion. La transformée de Fourier de la fonction d'onde s'écrit alors $\tilde{\psi}(p, t) = \tilde{\psi}(p, 0) \exp(i\phi(p, t))$, ce qui signifie que la densité de probabilité $|\tilde{\psi}(p, t)|^2 = |\tilde{\psi}(p, 0)|^2$ est indépendante du temps, comme illustré Fig. 5.2. Ainsi les

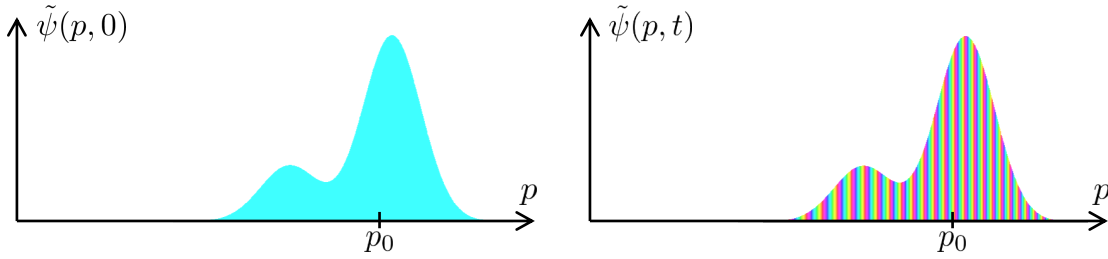


FIGURE 5.2 – Exemple de fonction $\tilde{\psi}(p, 0)$ à l'instant initial (à gauche) et à un instant t ultérieur (à droite). Seule la phase évolue au cours du temps, de sorte que la densité de probabilité $|\tilde{\psi}(p, t)|^2$ est inchangée.

valeurs moyennes associées à l'impulsion comme

$$\langle p \rangle = \int p |\tilde{\psi}(p, t)|^2 dp = \int p |\tilde{\psi}(p, 0)|^2 dp, \quad (5.70)$$

ou $\Delta p = \sqrt{\langle (p - p_0)^2 \rangle}$ seront des constantes du mouvement. L'impulsion moyenne $\langle p \rangle$ se conserve donc pour une particule libre, de même que toute fonction de l'impulsion p . Ce résultat peut s'interpréter comme une manifestation du principe d'inertie en mécanique quantique. En revenant dans l'espace direct, on en déduit la solution générale de l'équation de Schrödinger pour une particule libre

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(p, 0) \exp\left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t\right) e^{ipx/\hbar} dp, \quad (5.71)$$

où l'amplitude complexe $\tilde{\psi}(p, 0)$ peut être obtenue à partir de la transformée de Fourier de la condition initiale $\psi(x, 0)$, soit

$$\tilde{\psi}(p, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x, 0) e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (5.72)$$

Cette solution générale permet de calculer numériquement la propagation d'un paquet d'ondes de forme arbitraire, le calcul étant très efficace grâce à l'algorithme FFT de transformée de Fourier rapide [18]. On pourra consulter www.quantum-physics.polytechnique.fr/freeWavepacket.php pour observer l'évolution temporelle de paquets d'ondes de différentes formes.

L'éq. 5.71 s'interprète très simplement dans cadre du formalisme de Dirac, puisqu'elle correspond à la solution générale de l'équation de Schrödinger, consistant à écrire $|\psi(t)\rangle$ comme une superposition d'états stationnaires

$$|\psi(t)\rangle = \int \langle p | \psi(0) \rangle \exp\left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t\right) |p\rangle dp. \quad (5.73)$$

L'exponentielle complexe correspond effectivement au facteur attendu en $\exp(-iEt/\hbar)$ pour un état propre de l'Hamiltonien d'énergie cinétique $E = p^2/(2m)$.

Dans le cas de la fonction $\tilde{\psi}(p, 0)$ représentée Fig. 5.2, une résolution numérique donne le paquet d'ondes représenté Fig. 5.3. On observe qu'entre l'instant initial t_0 et l'instant t le paquet d'ondes s'est non seulement déplacé vers la droite, mais aussi que sa forme s'est modifiée et présente un étalement significatif. Nous allons maintenant étudier l'origine de ces deux phénomènes.

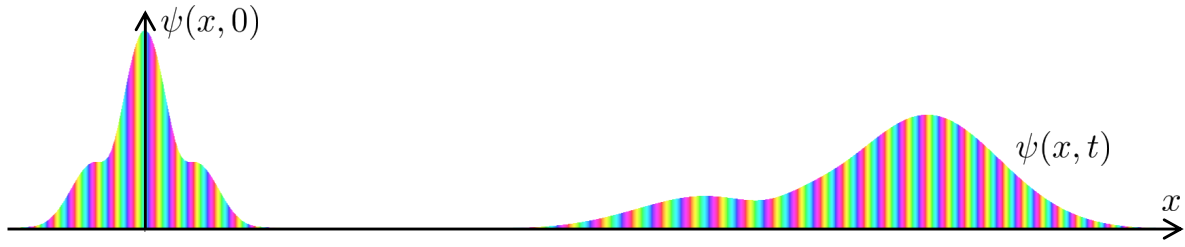


FIGURE 5.3 – Représentation de la fonction d'onde à l'instant initial, $\psi(x, 0)$ (à gauche), et à l'instant t , $\psi(x, t)$ (à droite). Ces fonctions ont été obtenues par transformée de Fourier inverse des fonctions représentées Fig. 5.2 dans l'espace des impulsions.

5.3.2 Déplacement d'un paquet d'ondes

Pour interpréter l'origine physique du déplacement du paquet d'ondes, supposons dans un premier temps que la largeur Δp de la fonction $\tilde{\psi}(p, 0)$ soit très étroite devant l'impulsion centrale p_0 . Dans ce cas, on peut effectuer le développement limité

$$\phi(p, t) \approx \phi(p_0, t) + (p - p_0) \frac{\partial \phi}{\partial p}(p_0, t) = -\frac{p_0 t}{m} \frac{p}{\hbar} + f(t), \quad (5.74)$$

où $f(t)$ est une fonction du temps indépendante de p . A un instant t donné, la phase $\phi(p, t)$ considérée comme une fonction de p présente donc une pente $-p_0 t / (m\hbar)$. Or, comme nous l'avons vu plus haut, une phase proportionnelle à p dans l'espace de Fourier se traduit par une translation dans l'espace direct. En identifiant le coefficient de $p/\hbar$ avec le paramètre x_0 apparaissant dans l'éq. 5.27, on en déduit que le paquet d'ondes s'est translaté d'une quantité $p_0 t / m$, ce qui correspond à une vitesse p_0 / m . On retrouve donc le résultat classique, à savoir que la particule s'est déplacée à une vitesse correspondant à l'impulsion p_0 divisée par la masse, où $p_0 = \langle \psi(t) | \hat{p} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{p} | \psi(0) \rangle$ représente ici l'impulsion moyenne de la particule.

On peut retrouver ce résultat sans faire d'approximation en calculant la position moyenne du paquet d'ondes, donnée par

$$\langle x \rangle_t = \langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle. \quad (5.75)$$

On peut encore écrire

$$\langle x \rangle_t = i\hbar \int \psi^*(x, t) \frac{-ix}{\hbar} \psi(x, t) dx = i\hbar \int \tilde{\psi}^*(p, t) \frac{\partial \tilde{\psi}(p, t)}{\partial p} dp \quad (5.76)$$

où nous avons utilisé le théorème de Parseval-Plancherel ainsi que l'éq. 5.20. Or, en dérivant l'éq. 5.69, on obtient

$$\frac{\partial \tilde{\psi}(p, t)}{\partial p} = \frac{\partial \tilde{\psi}(p, 0)}{\partial p} \exp\left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t\right) - i \frac{p}{m\hbar} t \tilde{\psi}(p, t). \quad (5.77)$$

En remplaçant dans l'éq. 5.76, on obtient

$$\langle x \rangle_t = i\hbar \int \tilde{\psi}^*(p, 0) \frac{\partial \tilde{\psi}(p, 0)}{\partial p} dp + \int \tilde{\psi}^*(p, t) \frac{pt}{m} \tilde{\psi}(p, t) dp. \quad (5.78)$$

En écrivant cette dernière équation à l'instant $t = 0$ on peut identifier le premier terme à $\langle x \rangle_{t=0}$. Par ailleurs, le second terme fait directement apparaître la valeur moyenne de l'impulsion p , dont on a vu qu'elle était indépendante du temps. On en déduit

$$\langle x \rangle_t = \langle x \rangle_{t=0} + \frac{\langle p \rangle}{m} t. \quad (5.79)$$

Ce résultat est parfaitement satisfaisant : en l'absence de forces exercées sur la particule, la position moyenne du paquet d'ondes se déplace à une vitesse constante égale à $\langle p \rangle / m$.

Il est possible de retrouver directement ce dernier résultat dans le cadre du formalisme de Dirac à l'aide du théorème d'Ehrenfest. D'après l'éq. 3.121, on a en effet

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{x}, \hat{H}] | \psi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2m} \langle \psi(t) | [\hat{x}, \hat{p}^2] | \psi(t) \rangle. \quad (5.80)$$

Or

$$[\hat{x}, \hat{p}^2] = [\hat{x}, \hat{p}] \hat{p} + \hat{p} [\hat{x}, \hat{p}] = 2i\hbar \hat{p}, \quad (5.81)$$

d'où l'on déduit

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{2i\hbar}{2mi\hbar} \langle \psi(t) | \hat{p} | \psi(t) \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}. \quad (5.82)$$

La dérivée par rapport au temps de la position moyenne est donc égale à l'impulsion moyenne divisée par la masse, c'est à dire la vitesse moyenne, ce qui nous redonne bien l'éq. 5.79 après intégration sur le temps.

5.3.3 Étalement d'un paquet d'ondes

L'éq. 5.74 n'est qu'une approximation au premier ordre de la phase acquise par la particule lors de sa propagation. En réalité, la phase $\phi(p, t)$ est quadratique en p , ce qui conduit non seulement à une translation mais aussi à une déformation du paquet d'ondes, comme on peut le constater Fig. 5.3 où la forme de la fonction d'onde $\psi(x, t)$ est très différente de la fonction d'onde initiale. De plus, on peut remarquer sur cette figure que la longueur d'onde de de Broglie n'est pas uniforme, avec une longueur d'onde environ deux fois plus courte sur le front avant par rapport au front arrière. On peut interpréter cette observation en considérant que les différentes composantes du paquet d'ondes initial sont associées à des impulsions très différentes, variant pour cet exemple d'environ un facteur 2 entre la partie gauche et la partie droite de la distribution représentée Fig. 5.2. Les impulsions p les plus grandes (associées à des longueurs d'ondes de de Broglie $\lambda = h/p$ plus petites) correspondent à des vitesses p/m plus importantes, ce qui explique qu'elles se retrouvent sur le front avant de l'impulsion. On interprète ainsi qualitativement l'origine physique de l'étalement du paquet d'ondes, avec en outre une prédiction sur la forme prise par le paquet d'ondes aux temps longs : si l'étalement résulte de la dispersion des impulsions constituant le paquet d'ondes, on s'attend à ce que la forme du paquet d'ondes aux temps longs reflète la distribution de vitesse, c'est à dire la distribution d'impulsions. C'est effectivement ce que montre le calcul effectué en annexe B.3, qui établit que pour de grandes valeurs du temps t on peut écrire

$$|\psi(x, t)|^2 \approx \frac{m}{t} |\tilde{\psi}(p = mx/t, 0)|^2. \quad (5.83)$$

Aux temps longs la densité de probabilité reproduit ainsi la fonction $|\tilde{\psi}(p, 0)|^2$ selon la loi d'homothétie $x = pt/m$. Ce résultat est à la base de la méthode dite du *temps de vol* qui est couramment employée pour mesurer l'impulsion d'une particule. Comme son nom l'indique, cette méthode consiste à mesurer le temps mis par la particule pour parcourir une distance donnée, ou – ce qui revient au même – à mesurer la distance x parcourue pendant un intervalle de temps t donné. On en déduit ainsi la vitesse de la particule $v = x/t$, et donc son impulsion $p = mv = mx/t$ si la masse est connue. Si la particule est initialement préparée dans un état $\psi(x, 0)$ comme celui représenté Fig. 5.3, l'écart type Δx lié à la fonction d'onde initiale donnera certes lieu à une incertitude sur la mesure de distance, ce qui se traduira par une incertitude $m\Delta x/t$ sur la mesure d'impulsion. Toutefois, en augmentant la durée t de la mesure, on pourra réduire cette erreur de mesure à une valeur arbitrairement petite, de sorte qu'il n'y a pas de limite fondamentale à la précision de la mesure expérimentale. La probabilité de mesurer une impulsion appartenant à l'intervalle $[p, p + dp]$ est égale à la probabilité de mesurer la particule dans l'intervalle $[x, x + dx]$, où $x = pt/m$ et $dx = (t/m)dp$. Cette probabilité est donc proportionnelle à la densité de probabilité

$$\left| \psi \left(x \approx \frac{m}{t} \frac{p}{m} t, t \right) \right|^2 \propto \left| \tilde{\psi} \left(p = m \frac{p}{m} \frac{t}{t}, 0 \right) \right|^2 = \frac{m}{t} |\tilde{\psi}(p, 0)|^2, \quad (5.84)$$

où nous avons utilisé l'éq. 5.83 pour exprimer $|\psi(x, t)|^2$ aux temps longs. La mesure de position aux temps longs nous redonne donc bien la densité de probabilité de l'impulsion de la particule.

D'après l'annexe B.3, on peut enfin montrer de manière générale que l'écart quadratique moyen caractérisant la largeur du paquet d'ondes obéit à la relation

$$\Delta x_t = \sqrt{\Delta x_{t=0}^2 + \frac{\Delta p^2}{m^2} t^2}. \quad (5.85)$$

Il s'agit d'une hyperbole dont le comportement au temps long tend vers l'asymptote

$$\Delta x_t \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{\Delta p}{m} t. \quad (5.86)$$

Cette dernière expression confirme l'origine physique de l'étalement du paquet d'ondes : c'est bien en raison de la dispersion de vitesse $\Delta p/m$ que le paquet d'ondes s'étale au cours du temps.

5.4 Mouvement d'une particule dans un potentiel $V(x)$

Revenons maintenant au problème du mouvement d'une particule ponctuelle dans un potentiel $V(x)$ non nul. L'équation de Schrödinger dans l'espace de Fourier n'est alors pas plus simple que dans l'espace direct, bien au contraire car – selon l'éq. 5.21 – chaque terme d'ordre n dans la décomposition de $V(x)$ en séries entières donnera lieu à une dérivée partielle d'ordre n en p dans l'équation différentielle portant sur $\tilde{\psi}(p, t)$. Une méthode plus efficace et qui ne repose pas sur l'analyse de Fourier consiste plutôt à décomposer la fonction d'onde sur une base propre de l'Hamiltonien $\hat{H}$, puis à écrire $\psi(x, t)$ à l'aide de l'éq. 3.91 comme une superposition d'états stationnaires. A cet effet, nous verrons au chapitre suivant comment rechercher les états propres de l'Hamiltonien $\hat{H}$ correspondant au mouvement d'une particule ponctuelle dans potentiel unidimensionnel $V(x)$.

Il existe toutefois une méthode numérique intéressante, appelée *méthode du pas fractionnée*, permettant de résoudre l'équation de Schrödinger à l'aide de l'analyse de Fourier. On cherchera ici à calculer numériquement la fonction d'onde $\psi(x, t_1)$ à un instant t_1 à partir de la fonction d'onde $\psi(x, t_0)$ à l'instant initial. Comme beaucoup de méthodes numériques, cette méthode consiste à découper l'intervalle de temps $t_1 - t_0$ en N pas δt suffisamment petits pour pouvoir appliquer des approximations appropriées, avec $t_1 - t_0 = N\delta t$. L'Hamiltonien $\hat{H}$ étant indépendant du temps, on pourra écrire l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t_1, t_0)$ à l'aide de la notation simplifiée

$$\hat{U}(t_1 - t_0) = \exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t_1 - t_0)\right), \quad (5.87)$$

sachant que l'opérateur d'évolution ne dépend ici que du temps écoulé $t_1 - t_0$. Compte tenu de la relation de composition sur les N pas temporels, on a

$$\hat{U}(t_1 - t_0) = \hat{U}(\delta t)\hat{U}(\delta t)\cdots\hat{U}(\delta t) = \hat{U}(\delta t)^N. \quad (5.88)$$

L'intervalle de temps δt étant supposé suffisamment petit, on pourra écrire au premier ordre

$$\hat{U}(\delta t) = \exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\delta t\right) \approx \hat{I} - i\frac{\hat{H}}{\hbar}\delta t = \hat{I} - i\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar}\delta t - i\frac{V(\hat{x})}{\hbar}\delta t. \quad (5.89)$$

Toujours au premier ordre en δt , on obtient

$$\hat{U}(\delta t) \approx \left(\hat{I} - i\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar}\delta t\right) \left(\hat{I} - i\frac{V(\hat{x})}{\hbar}\delta t\right) \approx \exp\left(-i\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar}\delta t\right) \exp\left(-i\frac{V(\hat{x})}{\hbar}\delta t\right). \quad (5.90)$$

On peut alors écrire l'opérateur d'évolution pour un pas temporel δt selon l'expression

$$\hat{U}(\delta t) \approx \hat{U}_p(\delta t)\hat{U}_x(\delta t), \quad (5.91)$$

où

$$\hat{U}_p(\delta t) = \exp\left(-i\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar}\delta t\right) \quad (5.92)$$

correspond à l'opérateur d'évolution associé au mouvement d'une particule libre, comme si l'Hamiltonien ne comportait que le terme d'énergie cinétique, tandis que

$$\hat{U}_x(\delta t) = \exp\left(-i\frac{V(\hat{x})}{\hbar}\delta t\right) \quad (5.93)$$

correspond à l'opérateur d'évolution associé à un Hamiltonien qui ne comporterait que le terme d'énergie potentielle. D'un point de vue numérique, l'approximation de $\hat{U}(\delta t)$ à l'aide de l'éq. 5.91 est préférable car cette expression correspond à un opérateur unitaire, qui conserve parfaitement la norme, tandis que l'éq. 5.89 ne conserve la norme qu'au premier ordre en δt . Comme son nom l'indique, la méthode du pas fractionné consiste à découper un pas temporel δt en deux demi-pas, le premier où l'on ne prend en compte que le terme d'énergie potentielle et le second où on ne prend en compte que le terme d'énergie cinétique. Considérant la fonction d'onde $\psi(x, t_0)$ à l'instant initial,

on prendra en compte l'effet du potentiel en écrivant simplement

$$\psi(x, t_0 + \delta t/2) = \hat{U}_x(\delta t)\psi(x, t_0) = \exp\left(-i\frac{V(x)}{\hbar}\delta t\right)\psi(x, t_0), \quad (5.94)$$

où l'on a utilisé la notation symbolique $\psi(x, t_0 + \delta t/2)$ pour indiquer qu'il s'agit de la fonction d'onde après seulement un demi-pas temporel, où nous n'avons pris en compte que l'effet du potentiel $V(x)$. Cette étape du calcul est immédiate dans l'espace direct puisqu'elle consiste à multiplier la fonction d'onde par un simple facteur de phase dépendant de x . Pour prendre en compte l'effet de l'énergie cinétique, il est bien sûr beaucoup plus simple de passer dans l'espace de Fourier. On effectue donc une transformée de Fourier de la fonction d'onde $\psi(x, t_0 + \delta t/2)$ pour calculer $\tilde{\psi}(p, t_0 + \delta t/2)$, ce qui nous permet de traiter le second demi-pas temporel en écrivant

$$\tilde{\psi}(p, t_0 + \delta t) = \hat{U}_p(\delta t)\tilde{\psi}(p, t_0 + \delta t/2) = \exp\left(-i\frac{p^2}{2m\hbar}\delta t\right)\tilde{\psi}(p, t_0 + \delta t/2). \quad (5.95)$$

A nouveau cette étape du calcul consiste à multiplier la fonction d'onde (dans l'espace de Fourier) par un simple facteur de phase dépendant cette fois de p . Connaissant $\tilde{\psi}(p, t_0 + \delta t)$, une transformée inverse permet d'en déduire $\psi(x, t_0 + \delta t)$ ce qui achève le traitement d'un pas temporel δt complet. Selon l'éq. 5.88, il suffit de répéter cette opération N fois pour en déduire la fonction d'onde $\psi(x, t_1)$ à l'instant final. La transformation de Fourier étant une opération extrêmement rapide d'un point de vue numérique grâce à l'algorithme de FFT [18], la méthode du pas fractionné est un algorithme très puissant pour calculer l'évolution temporelle de la fonction d'onde dans un potentiel de forme arbitraire.

5.5 Expérience des franges d'Young

Nous disposons maintenant du bagage théorique nécessaire pour décrire l'expérience des franges d'Young évoquée au chapitre 1. Considérons un état d'énergie bien définie E , ce qui nous permet d'écrire la solution de l'équation de Schrödinger sous la forme d'un état stationnaire $e^{-iEt/\hbar}|\varphi\rangle$, où le ket $|\varphi\rangle$ obéit à l'équation de Schrödinger indépendante du temps $\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$. Pour une particule libre, cette équation s'écrit

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}). \quad (5.96)$$

Introduisons le vecteur d'onde $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, ce qui revient à poser $E = \hbar^2 k^2/(2m)$. On obtient alors l'équation

$$\Delta\varphi(\vec{r}) + k^2\varphi(\vec{r}) = 0. \quad (5.97)$$

On reconnaît ici l'équation de Helmholtz, déjà discutée en 1.1.2. Ainsi, même si l'équation de Schrödinger est sensiblement différente de l'équation de d'Alembert (avec une dérivée première par rapport au temps dans le premier cas et une dérivée seconde dans le second cas), les solutions stationnaires (ou monochromatiques) obéissent à la même équation, à savoir l'équation de Helmholtz. Ce résultat remarquable justifie l'analogie parfaite entre mécanique quantique et optique ondulatoire, ce qui nous permettra de nous faire une image physique simple des phénomènes d'interférence observés

en mécanique quantique. Ainsi, la fonction complexe représentée Fig. 1.2, solution de l'équation de Helmholtz avec les conditions aux limites imposées par les fentes d'Young, peut s'interpréter tant comme l'évolution d'une onde classique que comme l'évolution de la fonction d'onde $\varphi(\vec{r})$ associée à la propagation d'une particule matérielle comme un électron ou un atome.

Tant en optique qu'en mécanique quantique, il existe un régime de propagation pour lequel la résolution de l'éq. 5.97 est grandement simplifiée, à savoir le régime de l'*approximation paraxiale*. Ce régime correspond à une onde proche d'une onde plane se propageant selon l'axe z , que l'on peut donc écrire comme le produit entre une porteuse e^{ikz} et une enveloppe $u(\vec{r})$ variant lentement à l'échelle de la longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$, soit

$$\varphi(\vec{r}) = u(\vec{r})e^{ikz}. \quad (5.98)$$

Comme le montre l'annexe B.2, l'enveloppe obéit alors à l'équation dit paraxiale

$$2ik \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0. \quad (5.99)$$

Cette équation est beaucoup plus simple à résoudre que l'équation de Helmholtz puisqu'il s'agit d'une équation différentielle du premier ordre en z . De plus, cette équation est parfaitement similaire à l'équation de Schrödinger étudiée plus haut, de sorte que nous pourrions utiliser la même méthode de résolution : connaissant $u(x, y, 0)$ dans un plan transverse donné, il suffit de calculer la transformée de Fourier $\tilde{u}(k_x, k_y, 0)$, de multiplier par le facteur de phase $\exp(-i(k_x^2 + k_y^2)z/(2k))$, puis d'effectuer une transformée de Fourier inverse pour déterminer $u(x, y, z)$ en tout point z . De plus, comme pour la propagation d'un paquet d'ondes, la fonction $u(x, y, z)$ prendra la forme de la transformée de Fourier $u(k_x, k_y, 0)$ pour de grandes valeurs de z . C'est le régime de Fraunhofer qui, comme le montre l'annexe B.2, permet d'écrire

$$u(x, y, z) \approx -\frac{ik}{z} \exp\left(ik \frac{x^2 + y^2}{2z}\right) \tilde{u}\left(\frac{kx}{z}, \frac{ky}{z}, 0\right) \quad (5.100)$$

pour des valeurs de z suffisamment grande.

Appliquons ce résultat à l'expérience des franges d'Young, en supposant qu'une onde plane d'amplitude u_0 est incidente sur un écran percé de deux trous séparés d'une distance a , chaque trou ayant une transmission décrite par la fonction $f(x, y)$ supposée centrée sur l'origine. L'enveloppe juste derrière les deux trous pourra alors s'écrire

$$u(x, y, 0) = u_0 (f(x - a/2, y) + f(x + a/2, y)) \quad (5.101)$$

On a alors

$$\tilde{u}(k_x, k_y, 0) = u_0 \tilde{f}(k_x, k_y) \left(e^{-ik_x a/2} + e^{ik_x a/2} \right) = 2u_0 \tilde{f}(k_x, k_y) \cos \frac{k_x a}{2}. \quad (5.102)$$

L'intensité lumineuse observée à une distance D de l'objet diffractant s'écrit donc

$$|u(x, y, D)|^2 = 4|u_0|^2 \frac{k^2}{D^2} \left| \tilde{f}\left(\frac{kx}{D}, \frac{ky}{D}\right) \right|^2 \cos^2 \frac{kxa}{2D} \quad (5.103)$$

$$= 2|u_0|^2 \frac{k^2}{D^2} \left| \tilde{f}\left(\frac{kx}{D}, \frac{ky}{D}\right) \right|^2 \left(1 + \cos \frac{kxa}{D}\right), \quad (5.104)$$

ce qui nous donne bien des franges de période $\lambda D/a$, comme établi en 1.1.2 par une approche plus qualitative.

5.6 Mouvement d'une particule dans un espace à trois dimensions

Dans le cas d'un mouvement à trois dimensions, nous aurons à considérer la fonction d'onde dans l'espace $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, soit $\psi(x, y, z) = \langle x, y, z | \psi \rangle$ que l'on peut encore noter $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$. Nous pouvons alors généraliser la définition de la transformée de Fourier au cas d'un espace tridimensionnel, en posant

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \mathcal{F}[\psi(\vec{r})] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3\vec{r}, \quad (5.105)$$

ce qui permet de calculer les valeurs moyennes de toute fonction de p_x , p_y et p_z . La fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ s'exprime alors à l'aide d'une transformée de Fourier inverse

$$\psi(\vec{r}) = \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\psi}(\vec{p})] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint \tilde{\psi}(\vec{p}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3\vec{p}. \quad (5.106)$$

La plupart des résultats établis plus haut pour un mouvement unidimensionnel peuvent alors se généraliser au cas d'un mouvement dans un espace à trois dimensions. En particulier, l'inégalité de Heisenberg devient un ensemble de trois inégalités :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.107)$$

Selon ces relations, il est impossible de définir simultanément la position $\vec{r}$ et l'impulsion $\vec{p}$ d'une particule au-delà d'une certaine limite. À une échelle suffisamment grande il sera possible de définir approximativement position et impulsion et d'observer la trajectoire d'un électron, par exemple dans une chambre à brouillard. Mais à l'échelle atomique, ces inégalités nous obligent à abandonner la notion même de trajectoire.

Chapitre 6

Systèmes à une dimension spatiale

Les états propres de l'Hamiltonien $\hat{H}$ d'un système physique jouent un rôle très important, notamment parce que ces états fournissent, en vertu du théorème spectral, une base propre de l'espace des états qui nous sera bien utile. En particulier, comme établi en 3.4.3, cette base propre de l'Hamiltonien peut être utilisée pour écrire une solution générale de l'équation de Schrödinger dans le cas où l'Hamiltonien est indépendant du temps. L'objectif de ce chapitre est d'étudier les états propres de $\hat{H}$ pour quelques systèmes simples, associés au mouvement d'une particule selon une seule dimension spatiale x , la particule étant placée dans un potentiel $V(x)$.

Nous chercherons donc les fonctions propres $\psi(x)$ et les valeurs propres E de l'Hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad (6.1)$$

ce qui revient à résoudre l'équation aux valeurs propres

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (6.2)$$

encore appelée équation de Schrödinger indépendante du temps.

6.1 Propriétés générales des états propres de l'Hamiltonien

6.1.1 Equation aux valeurs propres

En écrivant l'éq. 6.2 en termes de fonctions d'onde, et en faisant passer le terme $E\psi(x)$ dans le membre de gauche, on obtient l'équation différentielle

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + (E - V(x)) \right) \psi(x) = 0. \quad (6.3)$$

Comme mentionné au chapitre 4, l'ensemble des solutions mathématiques de cette équation différentielle linéaire du second ordre constitue un espace vectoriel de dimension 2, pour toute valeur de E . D'un point de vue physique, il en ira souvent autrement car ces solutions mathématiques ne sont pas toutes physiquement pertinentes.

6.1.2 Base propre constituée de fonctions réelles

Considérons l'espace propre associé à la valeur propre E , et montrons qu'il est toujours possible de construire une base de cet espace constituée uniquement de fonctions réelles. Pour cela, remarquons que l'éq. 6.3 est une équation différentielle dont les coefficients sont réels. En conséquence, le complexe conjugué de cette équation s'écrit simplement

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + (E - V(x)) \right) \psi^*(x) = 0. \quad (6.4)$$

Cela signifie que si $\psi(x)$ est fonction propre pour la valeur propre E , alors $\psi^*(x)$ est également fonction propre pour la même valeur propre, de même que toute combinaison linéaire non nulle de ces deux fonctions. En particulier, les parties réelles $\psi_r(x) = (\psi(x) + \psi^*(x))/2$ et imaginaire $\psi_i(x) = (\psi(x) - \psi^*(x))/(2i)$ appartiennent aussi à l'espace propre de $\hat{H}$ associé à la valeur propre E . Il y a alors deux cas de figure possibles. Soit les deux fonctions $\psi_r(x)$ et $\psi_i(x)$ sont linéairement indépendantes, auquel cas elles engendrent un espace vectoriel de dimension 2, c'est à dire l'ensemble de l'espace propre associée à la valeur propre E . Nous avons donc bien construit une base de cet espace constituée de deux fonctions réelles, comme annoncé. Soit les deux fonctions $\psi_r(x)$ et $\psi_i(x)$ ne sont pas linéairement indépendantes. Dans ce cas, $\psi(x)$ peut être remplacée par l'une des deux fonctions $\psi_r(x)$ ou $\psi_i(x)$, proportionnelles à $\psi(x)$ et dont l'une au moins est non nulle. Il n'est donc pas limitatif de se limiter à la recherche de fonctions réelles. En conclusion, il est possible de chercher une base propre de $\hat{H}$ constituée uniquement de fonctions réelles. Cela ne veut pas dire que toute fonction propre sera réelle, car il est toujours possible de construire des combinaisons linéaires complexes à partir de nos fonctions de base réelle. Mais il faudra retenir qu'il n'est pas limitatif de chercher notre base propre en ne considérant que des fonctions réelles, ce qui permettra dans certains cas de simplifier la recherche des fonctions propres. Ce résultat restera valable dans le cas d'un mouvement tri-dimensionnel.

6.1.3 Potentiel invariant par parité

Considérons une fonction propre $\psi(x)$ de $\hat{H}$ associée à la valeur propre E , et écrivons l'éq. 6.3 au point $-x$. On obtient

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2}(-x) + (E - V(-x))\psi(-x) = 0. \quad (6.5)$$

Or, la dérivée première de la fonction $x \mapsto \psi(-x)$ par rapport à x s'écrit

$$\frac{d}{dx}\psi(-x) = -\frac{d\psi}{dx}(-x). \quad (6.6)$$

En dérivant une seconde fois par rapport à x , on obtient

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(-x) = \frac{d}{dx} \left(-\frac{d\psi}{dx}(-x) \right) = \frac{d^2\psi}{dx^2}(-x), \quad (6.7)$$

de sorte que la dérivée seconde de ψ prise au point $-x$ est égale à la dérivée seconde de la fonction $\psi(-x)$. On peut donc écrire l'éq. 6.5 sous la forme

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + (E - V(-x)) \right) \psi(-x) = 0. \quad (6.8)$$

Considérons maintenant un système invariant par parité, ce qui correspond au cas où le potentiel $V(x)$ est une fonction paire, soit $V(-x) = V(x)$. L'équation précédente s'écrit alors simplement

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + (E - V(x)) \right) \psi(-x) = 0. \quad (6.9)$$

On en déduit que la fonction $\psi(-x)$ est également fonction propre de l'Hamiltonien $\hat{H}$, pour la même valeur propre E . On peut alors procéder comme dans la section précédente et construire deux fonctions, respectivement paire (ou symétrique) et impaire (ou anti-symétrique)

$$\psi_S(x) = \psi(x) + \psi(-x) \quad (6.10)$$

$$\psi_A(x) = \psi(x) - \psi(-x) \quad (6.11)$$

Soit l'une de ces deux fonctions est nulle, ce qui signifie que la fonction de départ était déjà une fonction paire ou impaire. Soit ces deux fonctions sont non nulles, auquel cas elles sont linéairement indépendantes car orthogonales. En effet, leur produit scalaire hermitien s'écrit

$$\int \psi_A^*(x) \psi_S(x) dx = \int \psi_A^*(-x) \psi_S(-x) dx = - \int \psi_A^*(x) \psi_S(x) dx = 0, \quad (6.12)$$

où l'on a d'abord fait le changement de variable $x \rightarrow -x$, puis utilisé le fait que $\psi_S(x)$ est paire tandis que $\psi_A(x)$ est impaire. On peut en conclure que ψ_S et ψ_A engendrent un espace de dimension 2, c'est-à-dire la totalité de l'espace propre que nous considérons. Dans les deux cas, nous pouvons en conclure qu'il n'est pas limitatif de chercher une base de fonctions propres constituée uniquement de fonctions paires ou impaires, ce qui pourra souvent simplifier la recherche des fonctions propres.

6.1.4 Potentiel nul

Considérons à titre d'exemple le cas d'une particule libre, correspondant à $V(x) = 0$. Comme déjà discuté en 4.3.4, le spectre de $\hat{H}$ est alors constitué de l'ensemble des nombres réels positifs, que l'on peut écrire sous la forme $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$, où k représente le vecteur d'onde. L'espace vectoriel correspondant aux solutions de l'équation

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0 \quad (6.13)$$

est alors un espace de dimension 2 engendré par les deux ondes planes $\exp(ikx)$ et $\exp(-ikx)$. Mais selon 6.1.2 nous aurions aussi pu chercher une base propre constituée de fonctions réelles, auquel cas nous aurions trouvé les fonctions de base $\cos kx$ et $\sin kx$, déjà utilisée en 4.3.5 pour le problème du puits infini. Ces deux fonctions engendrent bien le même espace car $\exp(\pm ikx) = \cos kx \pm i \sin kx$. Comme le potentiel $V(x) = 0$ est évidemment pair, nous aurions aussi pu, selon 6.1.3, chercher

une base propre constituée uniquement de fonctions paires ou impaires, auquel cas nous aurions à nouveau trouvé la base $\{\cos kx, \sin kx\}$, comportant une fonction paire et une fonction impaire.

6.1.5 Potentiel constant par morceaux

Discutons enfin la recherche des fonctions propres de $\hat{H}$ dans le cas d'un puits de potentiel constant par morceaux, ce qui signifie que le potentiel prend des valeurs constantes dans différents intervalles. De tels potentiels, souvent utilisés en exercices, peuvent aussi être considérés comme de bonnes approximations de véritables dispositifs couramment utilisés en nanotechnologies, comme ceux reposant sur des hétérostructures semiconductrices. La Fig. 6.1 représente un exemple d'une telle structure, appelée *puits quantique*, qu'il est possible de réaliser grâce au contrôle de la croissance de ces matériaux semiconducteurs à la couche atomique près. En première approximation, le

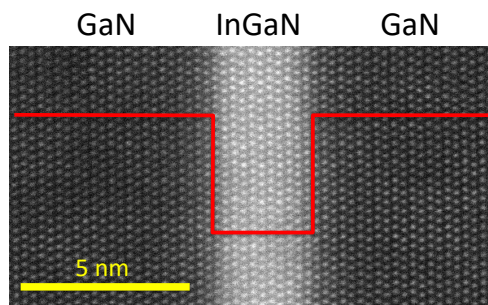


FIGURE 6.1 – Structure à puits quantique constituée d'un empilement de différents matériaux semiconducteurs, ici GaN et InGaN, observée par microscopie électronique en transmission à balayage (STEM). Image fournie par Gilles Patriarche (Centre de Nanosciences et Nanotechnologies, CNRS - Université Paris-Saclay). La courbe en rouge représente une modélisation du potentiel perçu par les électrons à l'aide d'une fonction constante par morceaux.

mouvement d'un électron dans une telle structure peut être modélisé à l'aide du potentiel constant par morceaux représenté en rouge.

A l'intérieur d'un intervalle donné, par exemple $x \in [x_1, x_2]$, on aura un potentiel constant, soit $V = V_0$. L'équation aux valeurs propres se ramène alors à

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + (E - V_0) \right) \psi(x) = 0. \quad (6.14)$$

Comme discuté en 4.3.5, on aura alors deux possibilités. Si $E - V_0$ est positif, on posera $E - V_0 = \hbar^2 k^2 / (2m)$ et la solution dans l'intervalle considéré sera la superposition de deux ondes planes donnée par l'éq. 4.62. Si $E - V_0$ est négatif, on posera $V_0 - E = \hbar^2 \kappa^2 / (2m)$ et la solution sera de la forme donnée par l'éq. 4.64. Dans ce dernier cas, il n'y a pas de raison d'éliminer *a priori* les solutions en $\exp(\pm \kappa x)$ tant que l'intervalle $[x_1, x_2]$ est fini, car il n'y a plus de problème de divergence exponentielle⁽ⁱ⁾. Il faudra par contre éliminer la solution divergente en $\exp(\kappa x)$ (resp. $\exp(-\kappa x)$) si l'intervalle considéré inclut la borne $+\infty$ (resp. $-\infty$). On pourra ensuite raccorder les solutions dans les différents intervalles par continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée. On

⁽ⁱ⁾ On pourrait s'étonner *a priori* de conserver des solutions pour lesquelles l'énergie cinétique classique $E - V(x)$ est négative, mais il ne faut pas oublier qu'en mécanique quantique l'énergie cinétique de la particule ne saurait être définie localement en vertu des inégalités de Heisenberg : mesurer l'énergie cinétique revient à mesurer l'impulsion, ce qui est incompatible avec une mesure simultanée de la position.

trouvera plus loin deux exemples de cette démarche, dans le cas du puits semi-infini en 6.3 et dans le cas du double puits en 6.4.4.

6.2 Etats liés et états de diffusion dans un puits de potentiel

Considérons le cas d'un puits de potentiel comme celui représenté Fig. 6.2. On suppose ici que la fonction $V(x)$ tend vers une valeur constante choisie égale à zéro lorsque x tend vers $+\infty$ ou $-\infty$ tandis que $V(x)$ est négatif au centre du puits.

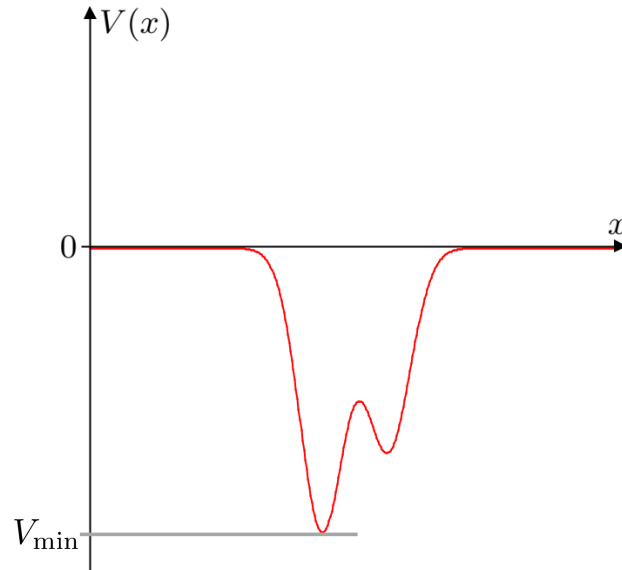


FIGURE 6.2 – Représentation d'un puits de potentiel $V(x)$ tendant vers zéro lorsque x tend vers l'infini.

6.2.1 Traitement classique

Dans le cadre de la mécanique classique, on peut écrire l'énergie mécanique du système sous la forme $E = p_x^2/(2m) + V(x)$. Le premier terme correspond à l'énergie cinétique de la particule, évidemment positive ou nulle, tandis que le second terme correspond à l'énergie potentielle. L'énergie sera donc toujours supérieure ou égale à $V_{\min} = \min(V)$, la plus petite valeur prise par l'énergie potentielle. On peut alors distinguer deux types de mouvements. Si l'énergie E est négative, cela signifie que la particule ne pourra jamais sortir d'un intervalle $[x_1, x_2]$, où x_1 et x_2 sont respectivement la plus petite et la plus grande solution de l'équation $V(x) = E$. On dit que le mouvement est borné : il donne lieu à une oscillation périodique entre deux valeurs extrêmes de la position. À l'inverse, si $E > 0$, la grandeur x peut prendre n'importe quelle valeur et le mouvement est non borné, avec deux cas possibles : soit la particule vient de la gauche du puits, avec une impulsion initiale $p_0 = \sqrt{2mE}$, accélère pendant la traversée du puits, et reprend son impulsion initiale p_0 après la traversée du puits en continuant son mouvement vers la droite. Soit la particule vient de la droite avec une impulsion initiale $-p_0$ en effectuant un mouvement similaire mais dans le sens inverse.

6.2.2 États liés

On retrouve cette classification en mécanique quantique. Dans le cas d'un mouvement borné, avec $V_{\min} < E < 0$, on parlera d'un *état lié*, tandis que dans le cas d'un mouvement non borné, avec $E > 0$, on parlera d'un *état de diffusion*. Pour une énergie E négative, posons $\kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ et considérons une région de l'espace $] -\infty, x_0]$ située à gauche du puits avec $|x_0|$ suffisamment grand pour que le potentiel puisse être considéré comme quasiment nul dans cet intervalle. On sait alors que la forme générale de la fonction propre dans cette région s'écrit

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}, \quad (6.15)$$

où A et B sont deux coefficients complexes arbitraires. Connaissant la fonction d'onde et sa dérivée en x_0 , la solution $\psi(x)$ de l'éq. 6.3 est alors déterminée de manière unique dans tout l'espace, les deux coefficients A et B permettant de décrire l'espace vectoriel de dimension 2 mentionné plus haut. Toutefois, la divergence en $\exp(-\kappa x)$ lorsque $x \rightarrow -\infty$ n'est pas physiquement acceptable, ce qui nous contraint à poser $B = 0$. L'espace des solutions physiquement acceptables, engendré par la fonction valant $\exp(\kappa x)$ pour $x < x_0$ et décrit à l'aide du seul coefficient A , est ainsi réduit à un espace vectoriel de dimension 1. On peut donc affirmer que la valeur propre E – si elle existe – est non dégénérée (dans le cas $E < 0$). De même, dans une région de l'espace située suffisamment loin à droite du puits, la solution pourra s'écrire

$$\psi(x) = A'e^{\kappa x} + B'e^{-\kappa x}, \quad (6.16)$$

où A' et B' sont des grandeurs proportionnelles à A et déterminées de manière unique. Pour une valeur arbitraire de l'énergie E , il n'y a aucune raison que A' soit non nulle, ce qui donnera lieu à une divergence inacceptable de la fonction d'onde lorsque x tend vers $+\infty$. Cette double contrainte d'une décroissance exponentielle en $\exp(-\kappa|x|)$ lorsque $|x|$ tend vers l'infini a pour conséquence que ce n'est que pour certaines valeurs discrètes de E que le terme divergent sera effectivement absent. On retrouve ainsi de manière générale la *quantification de l'énergie* déjà obtenue en 4.3.5 dans le cas du puits infini. La partie du spectre de l'Hamiltonien correspondant aux valeurs négatives de l'énergie est donc dénombrable. Remarquons enfin que la décroissance exponentielle de part et d'autre du puits de potentiel signifie que la fonction d'onde est localisée au voisinage de l'origine, ce qui justifie l'appellation d'états liés pour ces états propres d'énergie négative.

Les fonctions propres calculées numériquement pour notre puits de potentiel sont représentées Fig. 6.3. On peut remarquer que si on numérote les états liés par énergies E_n croissantes, en commençant par $n = 0$ pour le niveau fondamental, alors la fonction d'onde $\psi_n(x)$ correspondant au niveau E_n s'annule exactement n fois. Ce résultat, que l'on peut démontrer de manière générale [19], fournit une méthode très simple pour déterminer numériquement la fonction propre $\psi_n(x)$ associée à un niveau E_n donné. En effet, sachant que l'énergie d'un état lié appartient à l'intervalle $]V_{\min}, 0[$, on peut commencer par essayer une énergie $E = V_{\min}/2$ située au milieu de l'intervalle. On calcule alors l'unique solution $\psi(x)$ de l'éq. 6.3 qui soit en $\exp(\kappa x)$ pour $x < x_0$. Le plus souvent, la fonction obtenue présentera une divergence exponentielle lorsque x tend vers $+\infty$. Il suffit alors de compter le nombre de points où la fonction $\psi(x)$ s'annule. Si ce nombre est inférieur ou égal à n , cela signifie que

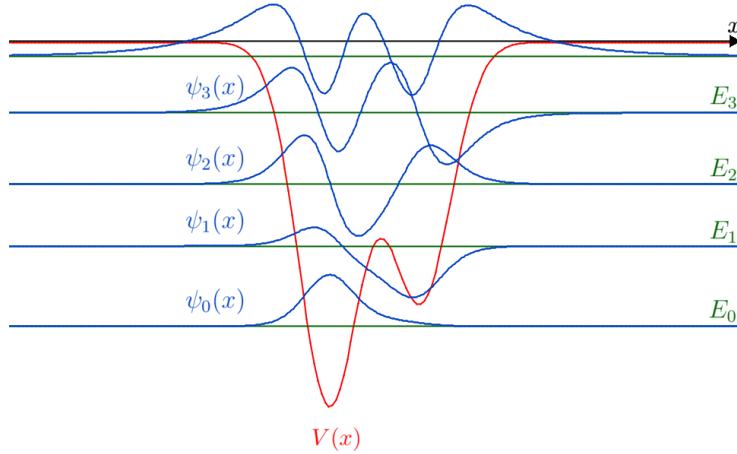


FIGURE 6.3 – *Etats liés dans un puits de potentiel à une dimension. Chaque fonction propre $\psi_n(x)$ s'annule exactement n fois.*

$E \leq E_n$, auquel cas on poursuit la recherche en essayant une valeur au milieu de l'intervalle $[E, 0]$. A l'inverse, si le nombre de nœuds de $\psi(x)$ est supérieur ou égal à $n + 1$, cela signifie que $E > E_n$, auquel cas on poursuit la recherche en essayant une valeur au milieu de l'intervalle $[V_{\min}, E]$. En poursuivant cette approche dichotomique, on divise à chaque itération l'intervalle de recherche par 2, ce qui permet de déterminer très rapidement l'énergie E_n . Une vingtaine d'itérations permet ainsi de déterminer la valeur propre recherchée avec une précision relative de $2^{-20} \approx 10^{-6}$.

6.2.3 Cas d'un puits symétrique

Dans le cas d'un puits de potentiel pair, on peut remarquer que les états propres liés sont nécessairement pairs ou impairs. En effet, nous avons vu en 6.1.3 que si $\psi_n(x)$ était fonction propre pour la valeur propre E_n , alors – pour un puits symétrique – la fonction $\psi_n(-x)$ était également fonction propre pour la même valeur propre. Or nous avons vu plus haut que les valeurs propres négatives étaient non dégénérées, ce qui signifie que $\psi_n(-x)$ appartient à l'espace de dimension 1 engendré par $\psi_n(x)$. Il existe donc un nombre complexe C tel que $\psi_n(-x) = C\psi_n(x)$. En appliquant cette relation au point $-x$, on obtient $\psi_n(-(-x)) = C\psi_n(-x) = C^2\psi_n(x)$, d'où l'on déduit $C = \pm 1$ et $\psi_n(-x) = \pm\psi_n(x)$. La fonction $\psi_n(x)$ est donc nécessairement paire ou impaire. Sachant en

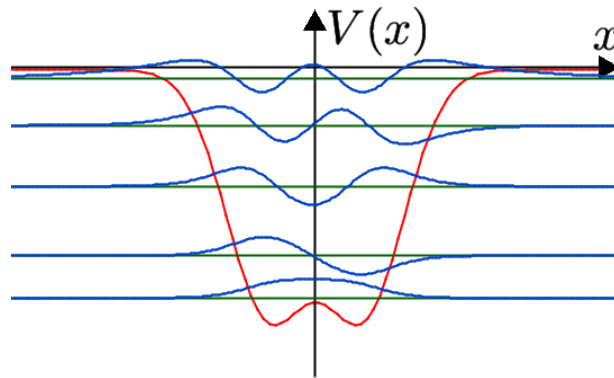


FIGURE 6.4 – *Etats liés dans un puits de potentiel invariant par parité. Les fonctions propres d'énergie négative (ou états liés) sont alternativement paires et impaires.*

outre que le nombre de nœuds de la fonction propre $\psi_n(x)$ est égal à n , on peut en déduire que $\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x)$. Comme l'illustre l'exemple représenté Fig. 6.4, les fonctions propres d'énergie négative d'un puits de potentiel pair sont donc alternativement paires et impaires, en commençant par une fonction paire ne s'annulant pas pour l'état fondamental.

6.2.4 Etats de diffusion

Considérons pour terminer un état propre d'énergie E positive, c'est-à-dire un état de diffusion. Dans ce cas la totalité de l'espace vectoriel de dimension 2 pourra être considéré comme physiquement acceptable. Les solutions se comportent à grande distance du puits comme des combinaisons linéaires des ondes planes $\exp(ikx)$ et $\exp(-ikx)$, où $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Ces ondes planes sont partiellement transmises et réfléchies au passage du puits de potentiel, ce qui explique pourquoi de tels états sont appelés états de diffusion. Le spectre est donc continu et les valeurs propres sont dégénérées deux fois. Bien entendu, ces fonctions ne sont pas de carré sommable, mais elles permettront de construire des paquets d'ondes qui constituent des solutions acceptables de l'équation de Schrödinger.

6.3 Puits semi-infini

6.3.1 Propriétés générales

Le puits semi-infini correspond à une situation où la particule n'a pas le droit de se trouver dans la région $x < 0$, ce qui correspond donc à une fonction d'onde nulle et un potentiel infini dans cette partie de l'espace. On supposera par ailleurs que le potentiel tend vers zéro pour $x \rightarrow +\infty$, et qu'il prend des valeurs négatives au voisinage de l'origine. Comme dans le cas précédent, on peut distinguer entre états liés, d'énergie négative, et états de diffusion, d'énergie positive. Comme

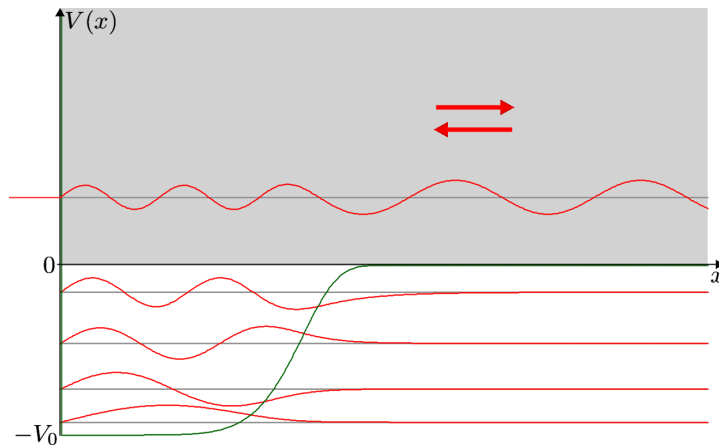


FIGURE 6.5 – Niveaux d'énergie dans un puits semi-infini. Le spectre d'énergie est discret pour $E < 0$ (états liés) et continu pour $E > 0$ (états de diffusion). Les niveaux d'énergie sont non dégénérés, avec un nombre de nœuds égal au numéro de l'état propre pour les états liés.

représenté Fig. 6.5, les propriétés générales du puits semi-infini sont très similaires à celles du puits de potentiel discuté plus haut, avec une quantification des états liés. La principale différence est que les états de diffusion sont maintenant non dégénérés car nous ne pouvons plus avoir d'onde incidente

venant de la gauche du puits. Pour un puits semi-infini, l'onde incidente vient nécessairement de la droite et est totalement réfléchiée par le puits, donnant lieu aux interférences observées sur l'état de diffusion représenté Fig. 6.5.

6.3.2 Modélisation par un potentiel constant par morceaux

Il est possible de donner une forme explicite des fonctions propres du puits semi-infini en modélisant ce dernier par le potentiel constant par morceaux représenté Fig. 6.6, prenant la valeur $V(x) = -V_0$ pour $x \in [0, L]$ et $V(x) = 0$ pour $x \geq L$. Commençons par rechercher un état de diffusion d'énergie $E > 0$. Appelons $k = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$ et $k' = \sqrt{2mE}/\hbar$ les vecteurs d'onde respectifs dans le puits et dans la barrière. Pour $0 \leq x \leq L$, on sait que la solution est une combinaison linéaire des fonctions de base $\cos kx$ et $\sin kx$. Néanmoins, sachant que la fonction d'onde est nulle pour $x < 0$ et continue en $x = 0$, on peut en conclure que seule la solution en $\sin kx$ est physiquement acceptable, comme nous l'avons fait en 4.3.5 dans le cas du puits infini. On en déduit que pour $x \in [0, L]$ la fonction propre peut s'écrire

$$\psi(x) = A \sin kx, \quad (6.17)$$

où A est une grandeur complexe. Ce résultat confirme ce que nous avons annoncé plus haut, à savoir que les valeurs propres du puits semi-infini sont non dégénérées, même pour les états de diffusion. Pour $x \geq L$, on peut écrire

$$\psi(x) = B \sin k'x + C \cos k'x. \quad (6.18)$$

Pour raccorder ces deux fonctions, il nous suffit d'appliquer la continuité au point $x = L$, d'une

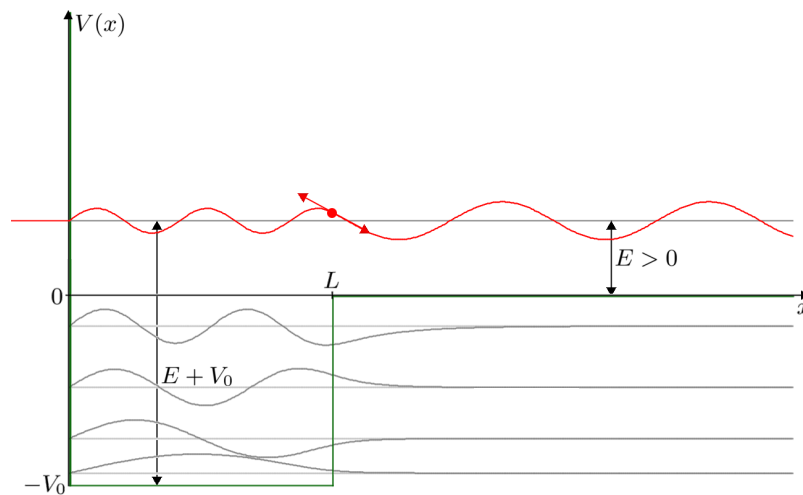


FIGURE 6.6 – Modélisation d'un puits semi-infini à l'aide d'un potentiel constant par morceaux. Les états liés sont représentés en gris tandis que la courbe en rouge représente un exemple d'état de diffusion.

part de la fonction d'onde,

$$\psi(L) = A \sin kL = B \sin k'L + C \cos k'L, \quad (6.19)$$

et d'autre part de sa dérivée

$$\frac{d\psi}{dx}(L) = Ak \cos kL = Bk' \cos k'L - Ck' \sin k'L. \quad (6.20)$$

On obtient ainsi le système linéaire en (B, C)

$$\begin{cases} B \sin k'L + C \cos k'L &= A \sin kL \\ B \cos k'L - C \sin k'L &= A \frac{k}{k'} \cos kL \end{cases} \quad (6.21)$$

Le déterminant de ce système s'écrit $\Delta = -\sin^2 k'L - \cos^2 k'L = -1$ et est donc non nul. Ainsi, pour A fixé il existe un unique couple (B, C) satisfaisant ce système d'équations. On en déduit que toutes les valeurs de l'énergie $E > 0$ sont permises.

La fonction d'onde pour $x > L$ peut encore s'écrire

$$\psi(x) = B \frac{e^{ik'x} - e^{-ik'x}}{2i} + C \frac{e^{ik'x} + e^{-ik'x}}{2} = \frac{C - iB}{2} e^{ik'x} + \frac{C + iB}{2} e^{-ik'x}, \quad (6.22)$$

ce qui s'interprète bien comme la superposition entre une onde incidente, de vecteur d'onde $-k'$, et une onde réfléchie, de vecteur d'onde $+k'$. Ces deux ondes ont des amplitudes $(C \pm iB)/2$ de même module, ce qui confirme qu'on a bien affaire à une réflexion totale de l'onde incidente.

Considérons maintenant un état lié d'énergie $E < 0$. Sachant que $E > -V_0$, la grandeur $E + V_0$ reste positive et on peut donc conserver le vecteur d'onde $k = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$ ainsi que la solution donnée par l'éq. 6.17 à l'intérieur du puits, même si la valeur de k est plus petite que pour les états de diffusion. Pour $x > L$, on introduit la grandeur $\kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$. La solution est alors une combinaison linéaire de $\exp(-\kappa x)$ et $\exp(\kappa x)$, mais le second terme devra être écarté pour obtenir une solution physiquement acceptable. On en déduit que, pour $x > L$, on a

$$\psi(x) = B e^{-\kappa x}. \quad (6.23)$$

Cette fonction exponentiellement décroissante dans la barrière est parfois appelée *onde évanescence*, même s'il ne s'agit pas d'une onde au sens strict puisqu'elle correspond à un vecteur d'onde $i\kappa$ imaginaire pur. En appliquant à nouveau les relations de continuité en $x = L$, on obtient

$$\psi(L) = A \sin kL = B e^{-\kappa L}, \quad (6.24)$$

et

$$\frac{d\psi}{dx}(L) = Ak \cos kL = -B\kappa e^{-\kappa L}. \quad (6.25)$$

On obtient cette fois-ci un système linéaire homogène en (A, B) , ne donnant lieu à une solution non triviale que si son déterminant est nul, ce qui va donner une relation entre k et κ . On peut aussi obtenir directement cette relation en effectuant le rapport entre les deux équations ci-dessus, soit

$$\frac{\sin kL}{k \cos kL} = -\frac{1}{\kappa}, \quad (6.26)$$

ou encore

$$\kappa = -k \cotan kL, \quad (6.27)$$

ce qui nous donne une première relation liant k et κ . Par ailleurs, on peut écrire la relation

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = E + V_0 + |E| = V_0, \quad (6.28)$$

ce que l'on peut encore écrire

$$k^2 + \kappa^2 = k_0^2, \quad (6.29)$$

où l'on a posé $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$. Cela signifie que le point de coordonnées (k, κ) doit être sur un cercle de rayon k_0 . La Fig. 6.7 illustre une méthode de résolution graphique du système de deux équations constitué par les éq. 6.27 et 6.29. Il faut d'une part que κL soit égal à la fonction

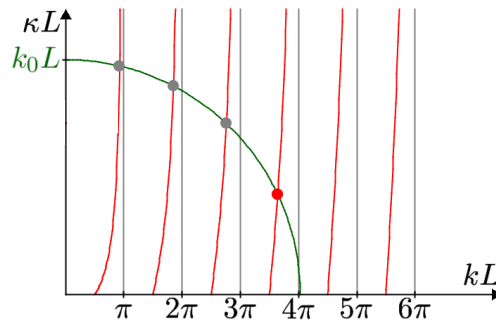


FIGURE 6.7 – Représentation en fonction de kL de la fonction $-kL \cotan kL$ (en rouge). Les solutions correspondent aux intersections avec un cercle de rayon k_0L , représenté en vert.

$-kL \cotan kL$, représentée en rouge, et d'autre part que le point de coordonnées $(kL, \kappa L)$ soit sur le cercle de rayon k_0L , représenté en vert. On retrouve ainsi la quantification des états liés, chaque point d'intersection correspondant à un niveau d'énergie. Pour les paramètres du puits semi-infini considéré ici, on observe un premier point d'intersection juste en-dessous de la première asymptote, soit pour une valeur de kL très légèrement inférieure à π , qui est la valeur qu'on aurait trouvée pour un puits infini de même largeur. Ainsi, l'arche de sinusoïde n'est pas tout à fait nulle en $x = L$, et se prolonge par une onde évanescence $\exp(-\kappa L)$ dans la barrière. On reconnaît ici l'état fondamental représenté Fig. 6.6. Pour les niveaux suivants, le point d'intersection intervient de plus en plus loin de l'asymptote et avec des valeurs de κ de plus en plus petites, de sorte que l'onde évanescence s'étend de plus en plus loin dans la barrière. On peut noter deux différences fondamentales par rapport au puits infini : d'une part, les vecteurs d'onde autorisés sont inférieurs aux valeurs correspondantes pour le puits infini, ce phénomène étant d'autant plus marqué que le niveau considéré s'approche de la barrière. D'autre part, le nombre d'états liés est limité et va naturellement dépendre du rayon k_0L du cercle. Dans l'exemple considéré ici, avec k_0L de l'ordre de 4π , on a 4 points d'intersection et donc 4 états liés. Mais on peut faire varier ce nombre, soit en modifiant la valeur de k_0 , ce qui revient à changer la profondeur V_0 du puits, soit en modifiant l'épaisseur L du puits.

Pour déterminer le nombre d'états liés, il suffit de compter le nombre de zones de largeur π nécessaires pour couvrir la distance séparant $\pi/2$ et k_0L . Pour cela, il suffit de calculer la différence entre k_0L et $\pi/2$, puis de diviser par π , et enfin de prendre le nombre entier immédiatement supérieur

à la valeur obtenue. Le nombre d'états liés est donc égal à

$$N = \left\lceil \frac{k_0 L - \pi/2}{\pi} \right\rceil = \left\lfloor \frac{k_0 L}{\pi} + \frac{1}{2} \right\rfloor. \quad (6.30)$$

Cette expression nous permet notamment de vérifier qu'il n'y a pas d'état lié si $k_0 L < \pi/2$, ce qui n'est pas surprenant car la fonction $-k \cot kL$ est négative pour $kL < \pi/2$, excluant toute intersection avec le quart de cercle de rayon $k_0 L$.

6.4 Effet tunnel

6.4.1 Barrière tunnel

Intéressons-nous maintenant à l'un des phénomènes emblématiques de la mécanique quantique, à savoir l'effet tunnel. La Fig. 6.8 représente ce qu'on appelle une *barrière tunnel*, associée à un potentiel positif, à l'inverse des puits de potentiel négatifs discutés plus haut. Cette barrière est modélisée ici par un potentiel $V(x)$ constant par morceaux, nul dans tout l'espace sauf dans l'intervalle $[0, a]$ où il prend la valeur $V_0 > 0$. On s'intéresse au cas où l'énergie E de la particule est inférieure à la hauteur V_0 de la barrière. D'un point de vue classique, la particule serait totalement réfléchie car son énergie est insuffisante pour franchir la barrière. En mécanique quantique, nous pouvons aborder le problème en suivant la démarche exposée en 6.1.5. Une fonction propre d'énergie $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ pourra donc s'écrire comme une combinaison linéaire d'ondes planes de vecteurs d'onde $\pm k$ pour $x < 0$ et $x > a$, et comme une superposition des fonctions $\exp(\kappa x)$ et $\exp(-\kappa x)$ pour $x \in [0, a]$, avec $V_0 - E = \hbar^2 \kappa^2 / (2m)$. Les conditions de continuité en $x = 0$ et $x = a$ permettent alors de déterminer les relations entre les différentes fonctions impliquées. A l'intérieur du sous-espace de dimension 2 associé à la valeur propre E , on s'intéresse à la solution correspondant à une onde incidente venant de la gauche, partiellement transmise et réfléchie par la barrière. Cela signifie que la solution à droite de la barrière est de la forme $\exp(ikx)$, comme représenté Fig. 6.8. Les calculs montrent qu'il est effectivement possible d'obtenir cette onde transmise, phénomène connu sous le nom d'*effet tunnel*.

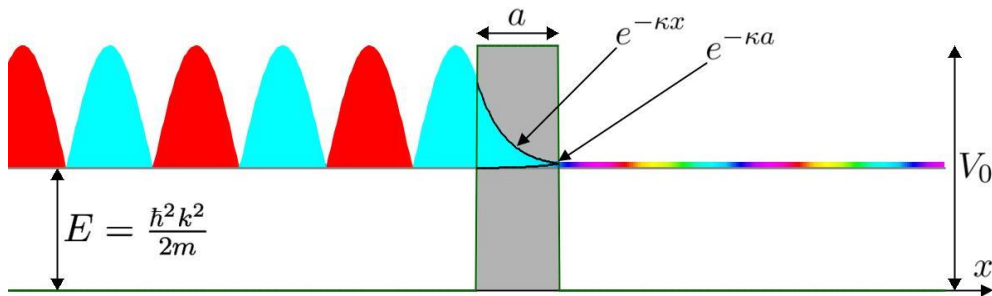


FIGURE 6.8 – Représentation d'une barrière tunnel de hauteur V_0 et de largeur a . La fonction d'onde représentée correspond à l'interférence entre une onde incidente et une onde réfléchie à gauche de la barrière et une onde transmise à droite de la barrière.

Le calcul complet de la probabilité de transmission T ayant été fait en petites classes, nous ne discuterons ici que le cas limite d'une barrière très épaisse, ce qui correspond à $\kappa a \gg 1$. Dans le cadre de cette approximation, la fonction d'onde dans la barrière est très proche de la seule onde

évanescence $\exp(-\kappa x)$, le terme en $\exp(\kappa x)$ ne servant qu'à assurer la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = a$. Comme l'illustre la Fig. 6.8, on peut alors considérer que l'amplitude de la fonction d'onde décroît exponentiellement dans la barrière et est simplement multipliée par le facteur $\exp(-\kappa a)$ à la sortie de la barrière. La probabilité de transmission, proportionnelle au carré de l'amplitude de probabilité, sera alors proportionnelle à $\exp(-2\kappa a)$. Ce facteur d'atténuation exponentiel est une véritable signature de l'effet tunnel. Dans ce régime d'une barrière épaisse, le calcul complet donne effectivement la relation approximative

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp(-2\kappa a), \quad (6.31)$$

en accord avec notre estimation qualitative.

Bien entendu, ce n'est qu'à l'échelle atomique ou nucléaire qu'on obtiendra une transmission non négligeable. La Fig. 6.9 représente le résultat numérique dans le cas où $E = V_0/2$, d'une part pour un nucléon d'énergie $E = 10$ MeV et d'autre part pour un électron d'énergie $E = 5$ eV. On obtient effectivement une probabilité de transmission significative pour de telles énergies, typiques en physique nucléaire d'une part et en physique atomique ou du solide d'autre part. L'effet tunnel est

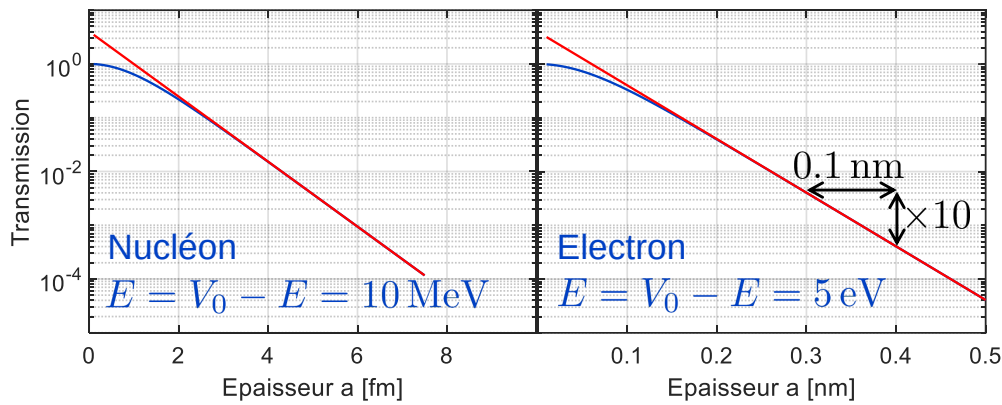


FIGURE 6.9 – Représentation en échelle semi-logarithmique de la transmission d'une barrière tunnel en fonction de son épaisseur a dans le cas d'un nucléon (à gauche) et d'un électron (à droite). La ligne droite correspond à l'approximation en $\exp(-2\kappa a)$ correspondant à l'éq. 6.31, valable lorsque $\kappa a \gg 1$.

donc bien une réalité physique à ces échelles. On peut également remarquer que notre approximation d'une variation en $\exp(-2\kappa a)$, représentée Fig. 6.9 par une ligne droite, est en excellent accord avec le calcul exact dès lors que la transmission est inférieure à 0.1.

6.4.2 Microscopie à effet tunnel

Considérons un premier exemple d'application de l'effet tunnel dans le domaine de la physique des basses énergies. Pour un électron de 5 eV devant franchir une barrière de 10 eV, la Fig. 6.9(b) montre qu'une augmentation de seulement 0.1 nm de l'épaisseur de la barrière se traduit par une atténuation de la transmission d'un facteur 10. Cette extrême sensibilité est mise à profit dans le *microscope à effet tunnel*. Cet instrument permet de sonder à l'échelle sub-nanométrique la densité électronique à la surface d'un échantillon en exploitant le *courant tunnel* produit par des électrons franchissant par effet tunnel la barrière de potentiel séparant l'échantillon d'une fine pointe placée

très près de l'échantillon, sans toutefois le toucher [20]. La distance entre la pointe et l'échantillon est maintenue constante par un dispositif d'asservissement utilisant comme signal d'erreur la différence entre le courant tunnel et une valeur de référence. La variation exponentielle du courant tunnel explique l'extrême précision du contrôle de la distance entre la pointe et l'échantillon. Il suffit alors de balayer la pointe selon les deux autres dimensions pour mesurer la topographie de l'échantillon à l'échelle atomique, raison pour laquelle cette méthode de microscopie est appelée *microscopie tunnel à balayage*, ou encore *Scanning Tunneling Microscopy* (STM).

6.4.3 Radioactivité alpha

Considérons maintenant un second exemple d'application de l'effet tunnel, cette fois dans le domaine de la physique des hautes énergies. Suite à la découverte par Henri Becquerel en 1896 des mystérieux *rayons uraniques* émis par des sels d'Uranium [21], Marie Skłodowska-Curie établit que ce phénomène, baptisé radioactivité, est indépendant du composé chimique dans lequel intervient l'Uranium. De plus, elle observe que le phénomène est encore plus intense dans le minerai brut que dans l'Uranium qui en est extrait, ce qu'elle explique par la présence dans le minerai d'un élément inconnu encore plus actif que l'Uranium [22]. Avec Pierre Curie, elle parviendra à isoler ce nouvel élément, le Polonium [23], de même qu'un autre élément encore plus radioactif baptisé Radium [24].

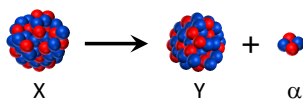


FIGURE 6.10 – *Processus de radioactivité α , lors duquel un noyau lourd (X) se désintègre en un noyau plus léger (Y), donnant lieu à l'émission d'une particule α , correspondant au noyau ${}^4_2\text{He}$.*

Le phénomène mis en évidence par Marie Skłodowska-Curie et Pierre Curie est en fait la radioactivité α , du nom de la particule α (*i.e.* un noyau d'hélium, ${}^4_2\text{He}$) émise lors la désintégration du noyau initial. Lors de ce processus, représenté Fig. 6.10, un noyau appelé X se transforme en un noyau plus léger Y suite à l'émission de la particule α . On caractérise l'activité d'une substance radioactive par la demi-vie ou période T , temps au bout duquel la moitié de la substance s'est désintégrée. Un aspect remarquable du phénomène est que la période varie considérablement entre les différents isotopes d'un même élément, avec par exemple 4.5 milliard d'années pour l'Uranium 238 et seulement 69 ans pour l'Uranium 232. La Fig. 6.11 représente en échelle semi-logarithmique la demi-vie T en fonction de $1/\sqrt{E}$, où E est l'énergie de la particule α émise. Ce graphe met en évidence la relation affine

$$\log T = a + \frac{b}{\sqrt{E}}. \quad (6.32)$$

En d'autres termes, le taux de désintégration s'écrit

$$\frac{1}{T} \propto \exp\left(-\frac{b \ln 10}{\sqrt{E}}\right). \quad (6.33)$$

Seul l'effet tunnel peut expliquer cette variation exponentielle [25, 26], vérifiée sur une dynamique couvrant une dizaine d'ordres de grandeur pour un élément donné. Comme l'illustre la Fig. 6.12, on peut modéliser le noyau X comme résultant de l'interaction entre le noyau Y et une particule α .

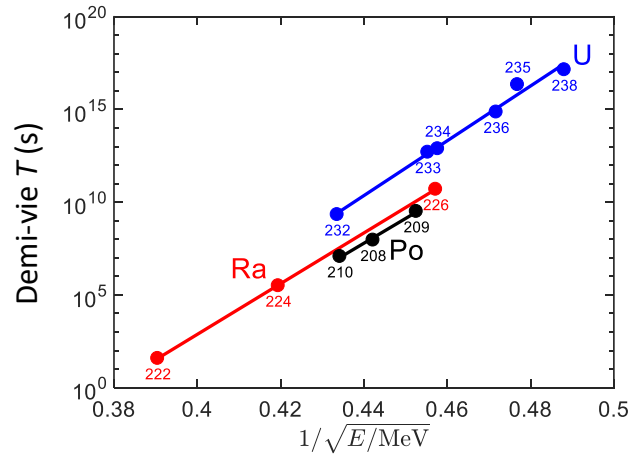


FIGURE 6.11 – Représentation en échelle semi-logarithmique de la demi-vie en fonction de l'inverse de la racine carrée de l'énergie de la particule α émise, pour différents isotopes de l'Uranium, du Polonium et du Radium.

A courte portée le potentiel est dominé par l'interaction nucléaire, tandis qu'à plus grande portée c'est la répulsion Coulombienne entre les deux noyaux, chargés positivement, qui domine. Si ce puits semi-infini admettait un état lié (d'énergie E négative), on aurait affaire à un noyau X stable, ce qui n'est pas le cas des isotopes radioactifs considérés ici. Pour une énergie E positive, on a en principe affaire à un état de diffusion. Mais pour certaines valeurs particulières de l'énergie, on peut obtenir un état métastable où la particule α reste piégée pendant un temps éventuellement très long, de l'ordre de la demi-vie T , avant de s'échapper par effet tunnel. Comme l'illustre la Fig. 6.12,

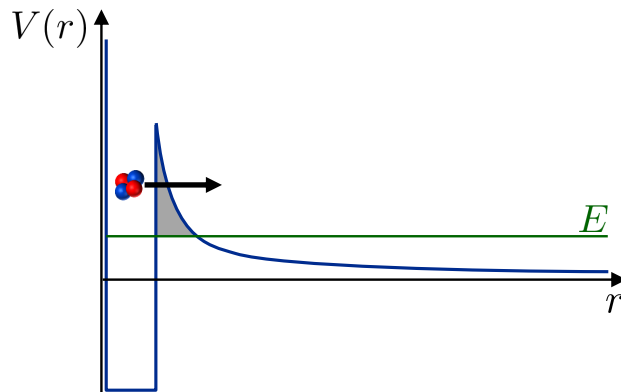


FIGURE 6.12 – Représentation schématique du potentiel d'une particule α en interaction avec le noyau Y , le comportement à courte portée étant dominé par l'interaction nucléaire tandis que le comportement à plus grande portée résulte de la répulsion Coulombienne.

l'épaisseur de la barrière à franchir est d'autant plus petite que l'énergie de la particule α émise est grande, ce qui explique qualitativement la variation exponentielle décrite par l'éq. 6.33. Le processus inverse où la barrière Coulombienne est franchie dans l'autre sens, également par effet tunnel, n'est autre que la fusion nucléaire.

6.4.4 Effet tunnel dans un double puits

Intéressons-nous maintenant à l'effet tunnel entre deux puits semi-infinis se faisant face, séparés par une barrière d'épaisseur Δ choisie suffisamment peu épaisse pour que cet effet tunnel soit non négligeable. On obtient alors le double puits constant par morceaux représenté Fig. 6.13. Les fonctions propres, calculées numériquement, sont conformes à nos attentes : comme le double puits est symétrique, on observe des fonctions propres alternativement paires et impaires, le nombre de nœuds de la fonction d'onde étant égal au numéro du niveau d'énergie.

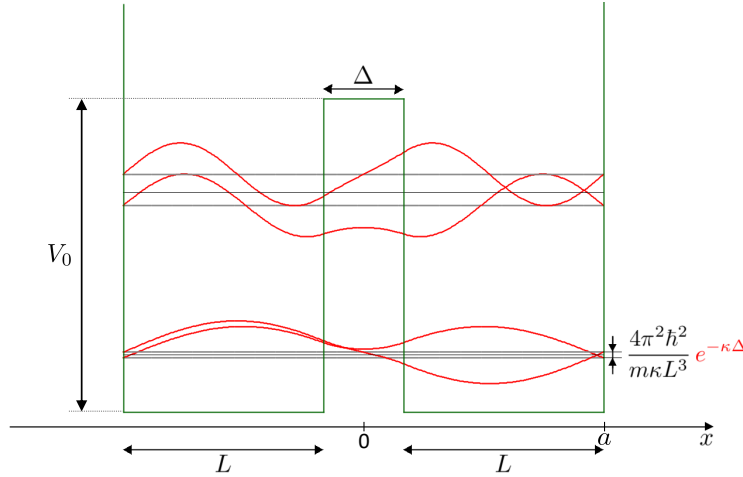


FIGURE 6.13 – Premiers états propres d'un double puits constant par morceaux, constitué de deux puits semi-infinis de largeur L et de hauteur V_0 séparés par une barrière de largeur Δ . Les traits fins représentent les niveaux d'énergie attendus dans le cas d'un puits semi-infini. On remarque en particulier que le niveau fondamental a une énergie strictement inférieure à celle du puits semi-infini.

On remarque en outre que les niveaux d'énergie sont groupés par paires. Chaque paire, constituée d'un état pair et d'un état impair, résulte du clivage des niveaux que l'on aurait obtenus pour des puits semi-infinis non couplés entre eux par effet tunnel. Afin de comprendre l'origine de ce phénomène, appliquons la méthode évoquée en 6.1.5 pour déterminer explicitement la forme des fonctions propres dans le cas d'un état d'énergie E inférieure à la hauteur V_0 de la barrière. On note $a = \Delta/2 + L$ l'abscisse du point où le potentiel devient infini. On peut alors définir un vecteur d'onde $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ caractérisant les solutions dans chacun des puits ($\Delta/2 < |x| < a$), et une grandeur $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ caractérisant les ondes évanescentes dans la barrière ($|x| < \Delta/2$). Le potentiel étant pair, on peut d'après 6.2.3 chercher des fonctions propres respectivement paires et impaires.

Considérons dans un premier temps le cas d'une fonction propre paire. Pour $|x| > \Delta/2$, on peut alors poser $\psi(x) = A \sin k(a - |x|)$, fonction qui s'annule bien en $|x| = a$ compte tenu du potentiel infini pour $|x| > a$. Pour $|x| < \Delta/2$, la solution paire s'écrit $\psi(x) = B \cosh \kappa x$. Ces expressions sont bien conformes aux fonctions propres paires représentées Fig. 6.13. La relation de continuité pour la fonction d'onde en $x = \Delta/2$ (soit $a - x = L$) nous donne

$$A \sin kL = B \cosh \frac{\kappa \Delta}{2}. \quad (6.34)$$

Par ailleurs, la continuité de la dérivée de la fonction d'onde en $x = \Delta/2$ s'écrit

$$-Ak \cos kL = B\kappa \sinh \frac{\kappa\Delta}{2}. \quad (6.35)$$

En calculant le rapport entre ces deux équations, on obtient la condition

$$\tan kL = -\frac{k}{\kappa} \coth \frac{\kappa\Delta}{2}. \quad (6.36)$$

Il est bien entendu inutile de vérifier la continuité en $x = -\Delta/2$, celle-ci étant automatiquement vérifiée par parité. Considérons maintenant une fonction propre impaire. On peut garder la même fonction pour $x > \Delta/2$ (et changer le signe pour $x < -\Delta/2$), mais la fonction pour $|x| < \Delta/2$ s'écrit maintenant $\psi(x) = B \sinh \kappa x$, ce qui correspond bien aux fonctions propres impaires représentées Fig. 6.13. Les relations de continuité deviennent

$$A \sin kL = B \sinh \frac{\kappa\Delta}{2} \quad (6.37)$$

$$-Ak \cos kL = B\kappa \cosh \frac{\kappa\Delta}{2} \quad (6.38)$$

En calculant le rapport entre ces deux équations, on obtient la condition

$$\tan kL = -\frac{k}{\kappa} \tanh \frac{\kappa\Delta}{2}. \quad (6.39)$$

On obtient ainsi deux équations, que l'on peut résoudre de manière numérique ou graphique, ce qui permet de trouver l'ensemble des états pairs et impairs d'énergie inférieure à V_0 .

Considérons deux cas limites extrêmes. Tout d'abord, dans le cas où l'épaisseur de la barrière Δ tend vers zéro, l'éq. 6.36 devient $\tan kL = +\infty$, soit $kL = \pi/2 + n\pi = (2n+1)\pi/2$, avec $n \in \mathbb{N}$, tandis que l'éq. 6.39 devient $\tan kL = 0$ soit $kL = n\pi = 2n\pi/2$, avec $n \in \mathbb{N}^*$. En réunissant ces deux conditions, on obtient un état propre à chaque fois que kL est un multiple non nul de $\pi/2$, c'est-à-dire à chaque fois que $k \times (2L)$ est un multiple non nul de π . On retrouve ainsi exactement l'éq. 4.67 obtenue en 4.3.5 pour un puits infini de largeur $2L$. A l'inverse, considérons le cas limite où l'épaisseur Δ de la barrière tend vers l'infini. Dans ce cas, la cotangente hyperbolique comme la tangente hyperbolique tendent toutes deux vers 1, de sorte que les éq. 6.36 et 6.39 tendent vers une même limite, que l'on peut écrire

$$\tan kL = -\frac{k}{\kappa}, \quad (6.40)$$

ou encore $\kappa = -k \cotan kL$, ce qui correspond exactement à l'éq. 6.27 que l'on avait obtenue dans le cas du puits semi-infini. On obtient donc un espace de dimension 2 engendré par les combinaisons linéaires symétrique et antisymétrique des solutions que nous avons déjà obtenues dans le cas d'un puits semi-infini. Ce résultat décrit exactement la situation attendue dans le cas de deux puits semi-infinis non couplés.

L'annexe B.4 donne le détail du calcul du clivage entre les deux premiers niveaux d'énergie dans le cas d'une barrière de grande épaisseur ($\kappa\Delta \gg 1$) et de grande hauteur ($V_0 \gg E$, ou encore $k \ll \kappa$). En appelant E_S l'énergie de l'état fondamental (symétrique) et E_A l'énergie du premier

état excité (antisymétrique), on obtient

$$E_A - E_S \approx \frac{4\pi^2\hbar^2}{m\kappa L^3} e^{-\kappa\Delta}, \quad (6.41)$$

ce qui correspond bien à la valeur reportée Fig. 6.13. On retrouve à nouveau dans le facteur exponentiel $e^{-\kappa\Delta}$ la marque de l'effet tunnel. Pour l'évaluation numérique de κ , on peut s'appuyer sur les hypothèses ci-dessus donnant lieu à un clivage extrêmement faible. Ceci permet d'écrire $E_A \approx E_S \approx E$ où $E \approx \hbar^2\pi^2/(2mL^2)$ et de déterminer $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$. Compte tenu de l'hypothèse $E \ll V_0$, on peut même écrire simplement $\kappa \approx \sqrt{2mV_0}/\hbar$ pour calculer le clivage entre les deux premiers niveaux à l'aide de l'éq. 6.41.

Considérons une première application physique de notre modèle du double puits, à savoir la molécule H_2^+ . Il s'agit de la molécule la plus simple possible puisqu'elle est constituée d'un seul électron. Les deux protons – près de 2000 fois plus lourds que l'électron – seront supposés fixes dans un premier temps. L'électron est ainsi soumis au double puits représenté Fig. 6.14(a), résultant de la somme des puits Coulombiens induits par chaque proton. Si les deux protons sont suffisamment proches, l'électron peut passer par effet tunnel d'un proton à l'autre, l'épaisseur Δ de la barrière à franchir étant d'autant plus faible que les noyaux sont proches. Comme montré plus haut, la conséquence de ce couplage tunnel est que l'énergie du système sera légèrement inférieure à l'énergie du niveau fondamental de l'atome d'hydrogène. Supposons maintenant que les noyaux soient libres de se déplacer. En raison de sa faible masse, le mouvement de l'électron est beaucoup plus rapide que celui des protons, ce qui permet de considérer que le nuage électronique se réagence instantanément quand la distance entre les deux protons est modifiée. L'énergie électronique, qui dépend de la distance entre les deux protons, joue alors le rôle d'une énergie potentielle gouvernant le mouvement des deux noyaux. Le fait que cette énergie diminue lorsque les deux noyaux se rapprochent signifie que la force dérivant de ce potentiel est de nature attractive : c'est là l'origine de la liaison chimique⁽ⁱⁱ⁾. Bien entendu, lorsque la distance entre les deux protons devient très faible, c'est la répulsion Coulombienne qui finira par l'emporter, de sorte que l'énergie potentielle du système présentera un minimum pour une distance qui n'est autre que la longueur de la liaison chimique. Ce même phénomène se généralise à toute molécule, même si le traitement théorique devient alors considérablement plus compliqué en raison des interactions entre électrons. Néanmoins, l'essentiel de la physique demeure : l'effet tunnel permet de délocaliser l'électron sur plusieurs atomes, ce qui a pour effet d'abaisser l'énergie du système et explique la cohésion de l'édifice moléculaire.

Considérons maintenant la molécule d'ammoniac NH_3 , dont le phénomène d'inversion constituera une seconde application de notre modèle du double puits. A l'équilibre, la molécule d'ammoniac adopte la structure d'une pyramide dont l'atome d'azote occupe un sommet. De manière similaire à ce que nous avons discuté pour H_2^+ , cela signifie que c'est cette structure qui minimise l'énergie électronique du système. Considérons maintenant une déformation particulière de la molécule lors de laquelle le plan des trois atomes d'hydrogène se déplace par rapport à l'azote, et appelons x la position relative de ce plan. Comme représenté Fig. 6.14(b), l'énergie du système sera donc

⁽ⁱⁱ⁾L'état symétrique est encore appelé *état liant* car son énergie diminue lorsque la distance entre les atomes diminue. A l'inverse, l'état électronique antisymétrique (qui n'est pas peuplé à température ambiante) est appelé *état anti-liant* car son énergie augmente lorsque la distance entre les atomes diminue, donnant lieu à une force répulsive.

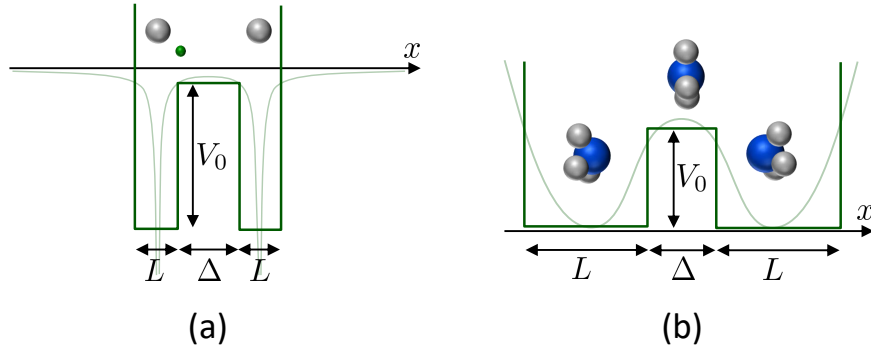


FIGURE 6.14 – Deux exemples de problèmes physiques pouvant être décrit à l’aide du modèle du double puits : le mouvement d’un électron dans la molécule H_2^+ (a) et l’inversion de la molécule d’ammoniac NH_3 .

minimale pour une valeur non nulle de x , correspondant à la structure pyramidale de la molécule à l’équilibre. Par symétrie, on aura également un second minimum pour une valeur opposée de x , donnant également une structure pyramidale image de la précédente par rapport au plan $x = 0$. On aura enfin un maximum local pour $x = 0$, correspondant à une structure plane. Le mouvement du plan des atomes d’hydrogène est donc décrit par le double puits de potentiel représenté Fig. 6.14(b). D’après ce que nous avons vu plus haut, l’état fondamental du système correspond à une fonction propre symétrique, d’égale amplitude dans chacun des deux puits. On obtient ainsi un résultat tout à fait remarquable : l’état fondamental de l’ammoniac est en réalité une superposition linéaire entre les deux structures pyramidales symétriques représentées Fig. 6.14(b). Les atomes d’hydrogène sont à la fois d’un côté et de l’autre de l’azote !

6.5 Oscillateur harmonique

Appliquons maintenant le formalisme de Dirac au cas d’un problème physique d’une grande importance, celui de l’oscillateur harmonique.

6.5.1 Oscillateur harmonique en mécanique classique

On considère un oscillateur harmonique classique à une dimension, associé à une particule de masse m se déplaçant selon l’axe x . La force de rappel $F = -kx$ pourra encore s’écrire $F = -m\omega^2x$, à condition de poser $\omega = \sqrt{k/m}$. Cette force dérive de l’énergie potentielle

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2. \quad (6.42)$$

Si on appelle p_x la quantité de mouvement, on peut décrire l’état classique de la particule par les deux grandeurs x et p_x , qui obéissent aux équations de Hamilton-Jacobi (voir 1.1.1)

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p_x}{m} \quad (6.43)$$

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{dV}{dx} = -m\omega^2x. \quad (6.44)$$

Introduisons les variables sans dimension

$$X = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad \text{et} \quad P = \frac{p_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}. \quad (6.45)$$

On obtient alors les équations différentielles

$$\frac{dX}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{\omega}{m\hbar}} p_x \quad (6.46)$$

$$\frac{dP}{dt} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \frac{dp_x}{dt} = -\omega \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (6.47)$$

soit

$$\frac{dX}{dt} = \omega P \quad (6.48)$$

$$\frac{dP}{dt} = -\omega X. \quad (6.49)$$

Pour résoudre ce système de deux équations différentielles linéaires couplées, il est utile d'introduire la grandeur complexe

$$\alpha = \frac{X + iP}{\sqrt{2}}. \quad (6.50)$$

On obtient alors

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{dX}{dt} + i \frac{dP}{dt} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\omega P - i\omega X) = -i\omega \frac{X + iP}{\sqrt{2}} = -i\omega \alpha. \quad (6.51)$$

La solution de cette équation différentielle linéaire à coefficient constant s'écrit

$$\alpha(t) = \alpha(0) \exp(-i\omega t). \quad (6.52)$$

La grandeur complexe $\alpha(t)$ décrit donc à la fréquence $\omega/(2\pi)$ un cercle de rayon $|\alpha(0)|$. En posant $\alpha(0) = \alpha_0 \exp(-i\phi)$, où α_0 est un nombre réel positif, on obtient $\alpha(t) = \alpha_0 \exp(-i(\omega t + \phi))$ et

$$X(t) = \sqrt{2} \operatorname{Re} \alpha(t) = \sqrt{2} \alpha_0 \cos(\omega t + \phi) \quad (6.53)$$

$$P(t) = \sqrt{2} \operatorname{Im} \alpha(t) = -\sqrt{2} \alpha_0 \sin(\omega t + \phi) \quad (6.54)$$

On retrouve ainsi le fait que la position et l'impulsion sont décrites par des fonctions sinusoïdales déphasées de $\pi/2$, de sorte que le point de coordonnées $(X(t), P(t))$ décrit une trajectoire circulaire dans le plan complexe.

6.5.2 Hamiltonien de l'oscillateur harmonique

Ecrivons l'Hamiltonien de notre oscillateur en mécanique quantique

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x}) = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2. \quad (6.55)$$

A l'aide des opérateurs associés aux grandeurs X et P définies plus haut,

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} \quad (6.56)$$

$$\hat{P} = \frac{\hat{p}_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}, \quad (6.57)$$

on peut reformuler l'Hamiltonien selon l'expression

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2). \quad (6.58)$$

Remarquons en outre que le commutateur $[\hat{X}, \hat{P}]$ peut s'écrire

$$[\hat{X}, \hat{P}] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x}, \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right] = \frac{1}{\hbar} [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hat{I}. \quad (6.59)$$

De plus, d'après les éq. 6.56 et 6.57 le produit des incertitudes sur X et P s'écrit

$$\Delta X \Delta P = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \Delta x \Delta p_x = \frac{\Delta x \Delta p_x}{\hbar} \geq \frac{1}{2}, \quad (6.60)$$

ce qui constitue une version adimensionnée de l'inégalité de Heisenberg. Remarquons enfin que l'opérateur différentiel $\hat{P}$ peut s'écrire

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} = -i \frac{d}{dX}. \quad (6.61)$$

Par analogie avec la grandeur complexe α , on introduit l'opérateur

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}). \quad (6.62)$$

A l'évidence, cet opérateur n'est pas auto-adjoint. Son adjoint s'écrit

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P}). \quad (6.63)$$

On introduit enfin l'opérateur $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$. Cet opérateur est naturellement auto-adjoint puisque $\hat{N}^\dagger = (\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{N}$. On obtient

$$\hat{N} = \frac{1}{2} (\hat{X} - i\hat{P}) (\hat{X} + i\hat{P}) \quad (6.64)$$

$$= \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2 + i[\hat{X}, \hat{P}]) \quad (6.65)$$

$$= \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - 1) \quad (6.66)$$

Cette dernière expression nous permet d'exprimer l'Hamiltonien à l'aide de l'opérateur $\hat{N}$ selon la relation

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right). \quad (6.67)$$

La diagonalisation de l'Hamiltonien se ramène donc à la diagonalisation de l'opérateur $\hat{N}$.

6.5.3 Diagonalisation de $\hat{N}$ à l'aide de la méthode de Dirac

Commençons par calculer quelques commutateurs qui nous seront utiles.

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2}[\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] = \frac{1}{2}(-i[\hat{X}, \hat{P}] + i[\hat{P}, \hat{X}]) = \hat{I}. \quad (6.68)$$

Ce commutateur nous permet d'évaluer le produit

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 = \hat{N} + \hat{I}. \quad (6.69)$$

Les commutateurs de $\hat{N}$ avec $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$ s'écrivent

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hat{a} \quad (6.70)$$

et

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger. \quad (6.71)$$

Soit $|\psi\rangle$ un état propre de l'opérateur $\hat{N}$ associé à la valeur propre n , obéissant donc à l'égalité

$$\hat{N}|\psi\rangle = n|\psi\rangle. \quad (6.72)$$

On supposera bien entendu que l'état $|\psi\rangle$ est normé, soit $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Considérons alors les vecteurs $\hat{a}|\psi\rangle$ et $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$. On a

$$\hat{N}\hat{a}|\psi\rangle = (\hat{a}\hat{N} + [\hat{N}, \hat{a}])|\psi\rangle = (n-1)\hat{a}|\psi\rangle \quad (6.73)$$

et

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = (\hat{a}^\dagger\hat{N} + [\hat{N}, \hat{a}^\dagger])|\psi\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|\psi\rangle. \quad (6.74)$$

On peut en conclure que les vecteurs $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ et $\hat{a}|\psi\rangle$ sont soit nuls, soit vecteurs propres de l'opérateur $\hat{N}$ pour les valeurs propres respectives $n+1$ et $n-1$. Pour savoir si ces vecteurs sont nuls, calculons les carrés de leurs normes. On obtient

$$\|\hat{a}|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{N}|\psi\rangle = n. \quad (6.75)$$

Sachant que le carré d'une norme est toujours positif ou nul, on en déduit la propriété

$$n \geq 0. \quad (6.76)$$

Les valeurs propres de $\hat{N}$ sont donc positives ou nulles. Par ailleurs,

$$\|\hat{a}^\dagger|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|(\hat{N}+1)|\psi\rangle = n+1. \quad (6.77)$$

A l'aide de l'éq. 6.75, on peut affirmer que si n est non nul, alors la norme du vecteur $\hat{a}|\psi\rangle$ est non nulle, et donc que ce dernier vecteur est vecteur propre de $\hat{N}$ pour la valeur propre $n-1$. Donc, à moins de passer par la valeur $n=0$, l'opérateur $\hat{a}$ permet de construire une suite ininterrompue de

valeurs propres, comme représenté sur la Fig. 6.15(a) dans le cas d'une valeur propre initiale non entière. Une telle situation n'est pas acceptable car en appliquant $\lceil n \rceil$ fois l'opérateur $\hat{a}$, on pourrait construire une valeur propre $n - \lceil n \rceil$ strictement négative, en contradiction avec l'éq. 6.76.

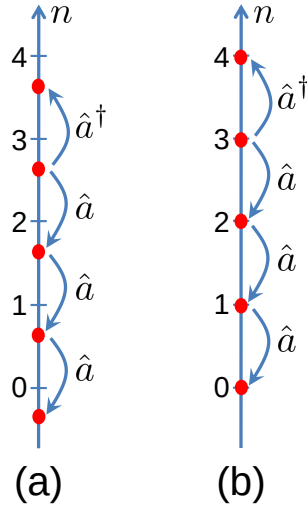


FIGURE 6.15 – Action des opérateurs $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$ dans le cas d'une valeur initiale non entière (a) ou entière (b). Le cas (a) aboutit au résultat absurde $n < 0$, ce qui nous permet de conclure que n est nécessairement entier.

Cette démonstration par l'absurde nous permet d'affirmer que la valeur propre initiale n est nécessairement entière. Ainsi, comme représenté Fig. 6.15(b), le processus s'arrête après n applications de l'opérateur $\hat{a}$. En outre, cette démarche permet non seulement d'affirmer que les valeurs propres sont nécessairement entières, mais aussi de montrer que le spectre de $\hat{N}$ est effectivement l'ensemble des entiers naturels $\mathbb{N}$. En effet, partons d'une valeur propre entière n et du vecteur propre correspondant, que nous appellerons dorénavant $|n\rangle$. Nous pouvons alors construire le ket

$$|n-1\rangle = \frac{\hat{a}|n\rangle}{\sqrt{n}} \quad (6.78)$$

vecteur propre pour la valeur propre $n-1$ et le ket

$$|n+1\rangle = \frac{\hat{a}^\dagger|n\rangle}{\sqrt{n+1}} \quad (6.79)$$

vecteur propre pour la valeur propre $n+1$. Comme le processus ne s'arrête que pour $n=0$, on peut ainsi construire un ensemble de vecteurs propres normés pour toute valeur propre entière.

6.5.4 Détermination des fonctions propres

Cherchons une fonction d'onde $\Psi(X)$ associée à la valeur propre $n=0$. D'après l'éq. 6.75, cette fonction d'onde vérifie nécessairement $\hat{a}\Psi(X) = 0$, soit

$$\left(\hat{X} + i\hat{P}\right)\Psi(X) = \left(X + \frac{d}{dX}\right)\Psi(X) = 0. \quad (6.80)$$

Il s'agit d'une équation différentielle du premier ordre, ce qui nous permet d'affirmer que la valeur propre $n = 0$ est non dégénérée. On reconnaît en outre l'équation génératrice des gaussiennes (équ. A.45) dont une solution normée s'écrit

$$\Psi_0(X) = \pi^{-1/4} \exp\left(-\frac{X^2}{2}\right). \quad (6.81)$$

On peut en déduire la fonction propre de l'état fondamental $\varphi_0(x)$ exprimée en fonction de la coordonnée dimensionnée $x = Xa_0$ (où $a_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$), à condition de prendre soin de conserver la norme

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_0(X)|^2 dX = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_0(x)|^2 dx = 1, \quad (6.82)$$

ce qui nous donne $\varphi_0(x) = \Psi_0(x/a_0)/\sqrt{a_0}$, soit

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{(\pi a_0^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a_0^2}\right) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right). \quad (6.83)$$

La non dégénérescence du niveau fondamental nous permet de montrer par récurrence que toutes les autres valeurs propres de $\hat{N}$ sont également non dégénérées. En effet, supposons que la valeur propre n soit non dégénérée, associée à l'état propre $|n\rangle$, et considérons un état propre quelconque $|\psi\rangle$ pour la valeur propre $n+1$. D'après les résultats établis plus haut, $\hat{a}|\psi\rangle$ appartient alors à l'espace propre associé à la valeur propre n , dont nous savons qu'il est engendré par l'état $|n\rangle$. Il existe donc un nombre complexe λ tel que $\hat{a}|\psi\rangle = \lambda|n\rangle$. En appliquant l'opérateur $\hat{a}^\dagger$ à cette dernière égalité, on obtient $\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi\rangle = \lambda\hat{a}^\dagger|n\rangle$. Mais comme $|\psi\rangle$ est un état propre de $\hat{N}$ pour la valeur propre $n+1$, on sait que $\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi\rangle = (n+1)|\psi\rangle$, et donc $|\psi\rangle = \lambda\hat{a}^\dagger|n\rangle/(n+1)$. L'espace propre associé à la valeur propre $n+1$ est ainsi engendré par $\hat{a}^\dagger|n\rangle$, et est donc bien de dimension 1. Le fait que les valeurs propres de $\hat{N}$ soit non dégénérées nous permet de justifier *a posteriori* la notation $|n\rangle$ utilisée plus haut pour les états propres. En effet, l'espace propre étant de dimension 1 la connaissance de la valeur propre n détermine l'état propre associé de manière unique (à une phase près). La relation directe entre $\hat{H}$ et $\hat{N}$ (équ. 6.67) nous permet d'en conclure que les valeurs propres de l'Hamiltonien sont non dégénérées, ce qui n'est pas pour nous surprendre s'agissant des états liés d'un problème à une dimension (voir 6.2.2).

L'équ. 6.79 nous permet de donner l'expression explicite de l'état $|n\rangle$, soit

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{a}^\dagger\right)^n |0\rangle. \quad (6.84)$$

On en déduit les fonctions d'onde correspondantes

$$\Psi_n(X) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(X - \frac{d}{dX}\right)^n \Psi_0(X) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}} \left(X - \frac{d}{dX}\right)^n \exp\left(-\frac{X^2}{2}\right). \quad (6.85)$$

Ces fonctions propres sont appelées les *fonctions de Hermite*. D'après le théorème spectral, elles constituent une base hilbertienne de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Les premières fonctions de Hermite sont représentées Fig. 6.16. Le potentiel étant pair, on obtient une alternance de fonctions paires et impaires (voir 6.2.3).

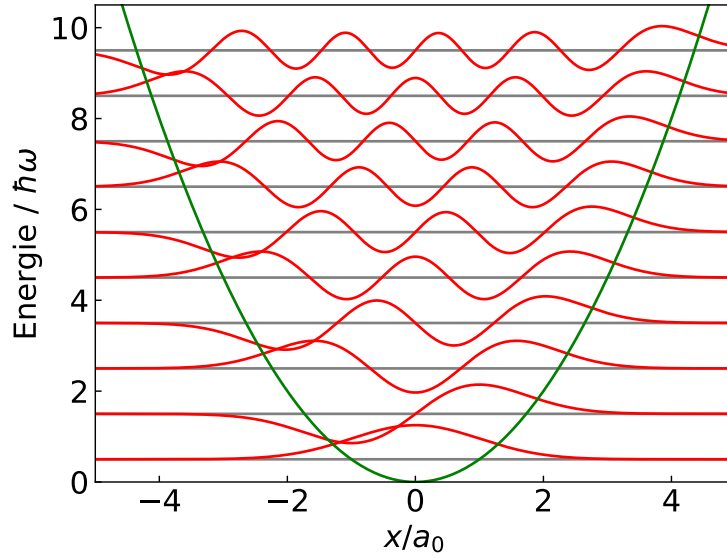


FIGURE 6.16 – Fonctions propres $\varphi_n(x)$ de l'oscillateur harmonique à une dimension.

Les fonctions de Hermite peuvent encore s'exprimer à l'aide des *polynômes de Hermite* $H_n(X)$ définis par

$$H_n(X) = (-1)^n e^{X^2} \frac{d^n}{dX^n} e^{-X^2}. \quad (6.86)$$

On peut alors écrire

$$\Psi_n(X) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{X^2}{2}} H_n(X), \quad (6.87)$$

ou encore

$$\varphi_n(x) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n! a_0}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a_0^2}\right) H_n\left(\frac{x}{a_0}\right). \quad (6.88)$$

6.5.5 Opérateurs position et impulsion

Les éq. 6.78 et 6.79 permettent d'écrire l'action des opérateurs $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$ dans la base propre $\{|n\rangle\}$, soit

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (6.89)$$

et

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (6.90)$$

la première expression devant être remplacée par $\hat{a} |0\rangle = 0$ dans le cas $n = 0$. Sous forme matricielle, on peut donc écrire

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.91)$$

Les opérateurs positions et impulsions peuvent être obtenus en inversant les éq. 6.62 et 6.63, ce qui nous donne

$$\hat{X} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \quad (6.92)$$

et

$$\hat{P} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{i\sqrt{2}}, \quad (6.93)$$

ou encore, sous forme matricielle

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (6.94)$$

et

$$\hat{p}_x = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.95)$$

Calculons enfin les valeurs moyennes et les dispersions de ces opérateurs dans un état propre $|n\rangle$ du système. D'après la définition même des opérateurs $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$, nous avons évidemment $\langle n|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\langle n|n-1\rangle = 0$ et $\langle n|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle = 0$. On en déduit $\langle n|\hat{X}|n\rangle = \langle n|\hat{P}|n\rangle = 0$, en accord avec les diagonales de zéros observée aux éq. 6.94 et 6.95. Ce résultat n'est pas une surprise dans la mesure où les états propres étant alternativement pairs et impairs, les intégrales associées aux valeurs moyennes de X et P sont évidemment nulles. Par ailleurs, on a $\hat{X}^2 = (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})/2$. Les valeurs moyennes des deux premiers termes sont clairement égales à zéro. De plus, à l'aide de l'éq. 6.69, on peut écrire

$$\langle X^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle n| (2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1) |n\rangle = n + \frac{1}{2}. \quad (6.96)$$

On obtient le même résultat pour $\langle P^2 \rangle$, soit une équipartition de l'énergie entre énergies cinétique et potentielle en accord avec le théorème du Viriel. On en déduit

$$\Delta X = \Delta P = \sqrt{n + \frac{1}{2}} \quad (6.97)$$

et

$$\Delta X \Delta P = n + \frac{1}{2}. \quad (6.98)$$

On vérifie que l'inégalité de Heisenberg (eq. 6.60) est bien respectée et qu'elle est saturée pour l'état fondamental, ce qui n'est pas surprenant puisque la fonction d'onde correspondante est une gaussienne réelle.

Chapitre 7

Intrication quantique

Dans les chapitres précédents, nous nous sommes souvent intéressés à l'état d'un électron individuel ou d'un atome individuel, en supposant implicitement que la particule considérée était indépendante du reste de l'univers. Mais, en toute rigueur, lorsque deux particules ont interagi par le passé, il devient impossible de considérer individuellement l'état de chacune de ces deux particules. C'est ce qu'on appelle l'*intrication quantique* (ou *quantum entanglement* en anglais) : l'état des deux particules doit alors être considéré de manière globale à tous les instants ultérieurs. Une conséquence expérimentale de cette intrication est l'observation de corrélations entre des mesures effectuées sur les deux particules. Dans un article publié en 1935, Einstein, Podolsky et Rosen (EPR) ont mis en exergue l'étrangeté toute particulière de ce phénomène d'intrication lorsque les deux particules considérées se trouvent très éloignées l'une de l'autre au moment de la mesure [27]. Considérons par exemple deux photons placés dans un état tel que leur état de polarisation soit toujours le même, avec pour chaque photon une chance sur deux d'être dans l'état $|\uparrow\rangle$ ou $|\leftrightarrow\rangle$. Imaginons que ces deux photons soient émis dans des directions opposées et parviennent à deux observateurs très éloignés, appelés traditionnellement Alice et Bob. Si Alice mesure l'état de polarisation de son photon dans la base $\{|\uparrow\rangle, |\leftrightarrow\rangle\}$, elle a une chance sur deux de mesurer $\uparrow$ ou $\leftrightarrow$. Il en va de même pour Bob. Mais Alice et Bob trouveront toujours des résultats identiques, donc parfaitement corrélés, car on sait que les deux photons ont été émis dans le même état de polarisation. Si on suppose qu'Alice est la première à faire la mesure, l'application du postulat de la mesure nous indique qu'au moment où elle observe son résultat, par exemple $\leftrightarrow$, alors le système est immédiatement projeté dans un état où le photon d'Alice se retrouve dans l'état $|\leftrightarrow\rangle$. Une conséquence tout à fait remarquable de la mesure effectuée par Alice est que le photon de Bob se trouve alors instantanément ⁽ⁱ⁾ dans l'état $|\leftrightarrow\rangle$, de sorte que Bob aura bien la certitude d'observer le résultat $\leftrightarrow$. Dans leur article intitulé *Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete ?*, EPR répondent à la question qu'ils posent dans le titre de leur article par la négative : plutôt qu'une *spooky action at a distance* (action fantôme à distance), les auteurs préfèrent invoquer des variables cachées encodant le véritable état de chacune des deux particules [27]. La nature indéterministe de la mesure ne serait qu'une illusion liée à la nature incomplète de la physique quantique. Dans un article publié la même

⁽ⁱ⁾ On peut montrer que ce résultat n'est pas en contradiction avec la théorie de la relativité : comme le résultat de la mesure faite par Alice est aléatoire, il n'est pas possible de transporter de l'information plus vite que la lumière par cette méthode. Ce n'est qu'après avoir comparé leurs résultats de mesure par des moyens de communication subliminiques qu'Alice et Bob pourront vérifier la parfaite corrélation entre leurs résultats.

année et portant le même titre, Niels Bohr répond au contraire par l'affirmative [28]. Cette différence fondamentale de points de vue est longtemps restée une question d'interprétation, jusqu'à ce qu'en 1966 John Bell déplace le débat sur le terrain scientifique, en proposant une inégalité [29, 30] devant être vérifiée par les théories à variables cachées mais pas par la physique quantique. Cette dernière triomphera de ce test expérimental [31, 32, 33, 34], résultat qui a été couronné par le prix Nobel de physique 2022 décerné à John Clauser, Alain Aspect et Anton Zeilinger [35]. Ces travaux constituent aussi l'une des pierres fondatrices de la seconde révolution quantique, qui vise notamment à exploiter les retombées technologiques de ce phénomène d'intrication quantique.

Dans ce chapitre, nous allons introduire la notion de produit tensoriel qui nous permettra de traiter des systèmes composites, comme par exemple un système constitué de deux particules. Nous pourrons alors exposer une méthode de génération de paires de photons intriqués, ce qui nous permettra de discuter les tests expérimentaux de l'inégalité de Bell.

7.1 Produit tensoriel

Considérons un *système composite*, constitué de deux parties qu'on pourra appeler (a) et (b). Il pourra s'agir par exemple de deux particules différentes, comme deux photons, mais aussi de deux degrés de liberté différents d'une même particule. Appelons $\mathcal{E}_a$ l'espace de Hilbert associé au sous-système (a) et $\mathcal{E}_b$ l'espace de Hilbert associé au sous-système (b), ces deux espaces étant engendrés par les bases Hilbertiennes respectives $\{|\alpha_m\rangle\}$ et $\{|\beta_n\rangle\}$.

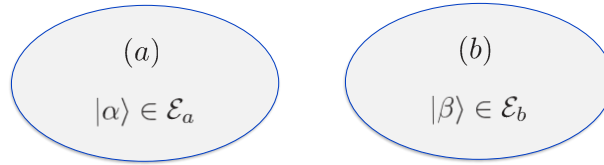


FIGURE 7.1 – *Système composite constitué de deux sous-systèmes (a) et (b) placé dans l'état factorisé $|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$.*

Si (a) est dans l'état $|\alpha\rangle$ et (b) est dans l'état $|\beta\rangle$, comme dans le cas représenté Fig. 7.1, on dira que le système global est dans l'état $|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$. L'opération notée $\otimes$, appelée produit tensoriel, est une forme bilinéaire de $\mathcal{E}_a \times \mathcal{E}_b$ vers l'espace produit tensoriel $\mathcal{E}_H = \mathcal{E}_a \otimes \mathcal{E}_b$, qui est l'espace de Hilbert approprié pour le système complet. Comme cet espace est un espace vectoriel, il n'est pas limité aux seuls états du type $|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$ (que l'on appellera états factorisés) mais comprend également toutes les combinaisons linéaires de tels états. La forme générale d'un élément de l'espace produit tensoriel s'écrit donc

$$|\psi\rangle = \sum_{m,n} c_{m,n} |\alpha_m\rangle \otimes |\beta_n\rangle. \quad (7.1)$$

Une conséquence immédiate de cette relation est que l'ensemble des vecteurs $\{|\alpha_m\rangle \otimes |\beta_n\rangle\}$ constitue une base de l'espace produit tensoriel, que l'on appellera une *base tensorielle* car elle n'est constituée que d'états factorisés. Dans le cas d'espaces de dimensions finies, on peut en déduire que la dimension de l'espace produit tensoriel est égale au produit des dimensions des deux espaces, soit $\dim \mathcal{E}_a \otimes \mathcal{E}_b = \dim \mathcal{E}_a \times \dim \mathcal{E}_b$. Cette dimension correspond au nombre de valeurs possibles pour les couples (m, n) ,

ou en d'autres termes au nombre de coefficients indépendants $c_{m,n}$ nécessaires pour définir un état de $\mathcal{E}_H$ de manière unique. Un état dit factorisable correspond au cas où les coefficients $c_{m,n}$ peuvent se mettre sous la forme d'un produit, soit $c_{m,n} = a_m b_n$, ce qui permettra d'écrire $|\psi\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$, avec $|\alpha\rangle = \sum_m a_m |\alpha_m\rangle$ et $|\beta\rangle = \sum_n b_n |\beta_n\rangle$. A l'inverse, un état non factorisable est appelé *état intriqué*.

On peut utiliser indifféremment l'une des notations ci-dessous

$$|\alpha_m\rangle \otimes |\beta_n\rangle = |\alpha_m\rangle |\beta_n\rangle = |\alpha_m, \beta_n\rangle = |m, n\rangle. \quad (7.2)$$

Le bra correspondant s'écrit alors

$$\langle \alpha_m | \otimes \langle \beta_n | = \langle \alpha_m | \langle \beta_n | = \langle \alpha_m, \beta_n | = \langle m, n |. \quad (7.3)$$

Par définition, le produit scalaire entre deux états factorisés est simplement égal au produit des produits scalaires, soit

$$(\langle \alpha | \otimes \langle \beta |) (|\alpha'\rangle \otimes |\beta'\rangle) = \langle \alpha | \alpha'\rangle \langle \beta | \beta'\rangle. \quad (7.4)$$

Par bilinéarité du produit scalaire hermitien, on peut en déduire le produit scalaire entre deux états quelconques $|\psi\rangle = \sum_{m,n} c_{m,n} |\alpha_m\rangle \otimes |\beta_n\rangle$ et $|\psi'\rangle = \sum_{m,n} c'_{m,n} |\alpha_m\rangle \otimes |\beta_n\rangle$, soit

$$\langle \psi | \psi'\rangle = \sum_{m,n} c_{m,n}^* c'_{m,n} \quad (7.5)$$

ce qui nous redonne bien entendu l'expression attendue du produit scalaire dans la base tensorielle.

Etant donnés deux opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$ agissant respectivement dans $\mathcal{E}_a$ et $\mathcal{E}_b$, on peut définir l'opérateur $\hat{A} \otimes \hat{B}$ agissant dans $\mathcal{E}_H$ par la relation

$$(\hat{A} \otimes \hat{B}) (|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle) = (\hat{A} |\alpha\rangle) \otimes (\hat{B} |\beta\rangle). \quad (7.6)$$

Remarquons que l'on pourra étendre de manière évidente tout opérateur $\hat{A}$ (resp. $\hat{B}$) agissant dans $\mathcal{E}_a$ (resp. $\mathcal{E}_b$) à l'ensemble de l'espace $\mathcal{E}_H$ à l'aide d'un produit tensoriel avec l'identité agissant dans l'autre espace, soit $\hat{A} \otimes \hat{I}_b$ (resp. $\hat{I}_a \otimes \hat{B}$). Cet opérateur étendu à l'ensemble de l'espace sera souvent noté simplement $\hat{A}$ (resp. $\hat{B}$), de sorte que l'on pourra écrire un produit tensoriel d'opérateurs comme un simple produit,

$$\hat{A} \otimes \hat{B} = (\hat{A} \otimes \hat{I}_b)(\hat{I}_a \otimes \hat{B}) = \hat{A}\hat{B}. \quad (7.7)$$

On peut en déduire que deux opérateurs agissant dans des espaces différents, comme $\hat{A}$ et $\hat{B}$ ci-dessus, commutent toujours entre eux. En effet,

$$\hat{B}\hat{A} |\alpha_m\rangle \otimes |\beta_n\rangle = (\hat{I}_a \otimes \hat{B})(\hat{A} \otimes \hat{I}_b) |\alpha_m\rangle \otimes |\beta_n\rangle = (\hat{I}_a \otimes \hat{B})(\hat{A} |\alpha_m\rangle) \otimes |\beta_n\rangle = \hat{A} |\alpha_m\rangle \otimes \hat{B} |\beta_n\rangle, \quad (7.8)$$

où l'on reconnaît évidemment $\hat{A}\hat{B} |\alpha_m\rangle \otimes |\beta_n\rangle$. L'élément de matrice d'un produit d'opérateurs se déduit aisément des règles énoncées ci-dessus, soit

$$(\langle \alpha_m | \otimes \langle \beta_n |) \hat{A} \otimes \hat{B} (|\alpha_{m'}\rangle \otimes |\beta_{n'}\rangle) = \langle \alpha_m | \hat{A} | \alpha_{m'}\rangle \langle \beta_n | \hat{B} | \beta_{n'}\rangle. \quad (7.9)$$

On peut considérer de multiples exemples d'applications du produit tensoriel, qui s'applique de manière évidente au cas d'un système constitué de plusieurs particules. Par exemple, l'espace de Hilbert approprié pour décrire l'atome d'hydrogène [10] s'écrit comme le produit tensoriel de l'espace décrivant le mouvement du proton par celui décrivant le mouvement de l'électron. De même, comme on le verra en 7.2, l'espace décrivant l'état de polarisation de deux photons s'écrit comme le produit tensoriel des espaces associés à chacun des photons. Mais on utilise également le produit tensoriel pour séparer les degrés de liberté externes (mouvement du centre de masse) et internes (par exemple le spin, que nous discuterons au chapitre suivant) d'un atome ou d'une particule.

On peut enfin utiliser le produit tensoriel à l'intérieur même de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ pour distinguer les degrés de liberté correspondant aux trois coordonnées cartésiennes. En effet, si on se donne une base dénombrable $\{|\varphi_m\rangle\}$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ (par exemple la base des fonctions de Hermite), on peut à y et z fixés décomposer sur cette base la fonction $x \mapsto \psi(x, y, z)$, ce qui nous donne

$$\psi(x, y, z) = \sum_m f_m(y, z) \varphi_m(x) \quad (7.10)$$

où le coefficient

$$f_m(y, z) = \int \varphi_m^*(x) \psi(x, y, z) dx \quad (7.11)$$

dépend bien entendu des valeurs choisies pour y et z . À z fixée, la fonction $y \mapsto f_m(y, z)$ peut à son tour être décomposée sur notre base $\{|\varphi_m\rangle\}$, ce qui nous donne

$$f_m(y, z) = \sum_n g_{m,n}(z) \varphi_n(y). \quad (7.12)$$

En procédant de même pour $g_{m,n}(z)$, on obtient

$$g_{m,n}(z) = \sum_p c_{m,n,p} \varphi_p(z). \quad (7.13)$$

On peut donc en déduire

$$\psi(x, y, z) = \sum_{m,n,p} c_{m,n,p} \varphi_m(x) \varphi_n(y) \varphi_p(z), \quad (7.14)$$

ce qui montre que $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) = \mathcal{L}(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}(\mathbb{R})$ a bien une structure de produit tensoriel, l'éq. 7.14 pouvant encore s'écrire

$$|\psi\rangle = \sum_{m,n,p} c_{m,n,p} |\varphi_m\rangle \otimes |\varphi_n\rangle \otimes |\varphi_p\rangle. \quad (7.15)$$

On remarquera que dans ce cas le produit tensoriel s'écrit simplement comme le produit des fonctions d'onde correspondantes, puisque la fonction d'onde associée à l'état factorisé $|\varphi_m\rangle \otimes |\varphi_n\rangle \otimes |\varphi_p\rangle$ s'écrit simplement $\varphi_m(x) \varphi_n(y) \varphi_p(z)$. Si on note simplement $|m, n, p\rangle$ l'état factorisé $|\varphi_m\rangle \otimes |\varphi_n\rangle \otimes |\varphi_p\rangle$, on pourra alors écrire

$$\langle x, y, z | n, m, p \rangle = (\langle x | \otimes \langle y | \otimes \langle z |) (|\varphi_m\rangle \otimes |\varphi_n\rangle \otimes |\varphi_p\rangle) \quad (7.16)$$

$$= \langle x | \varphi_m \rangle \langle y | \varphi_n \rangle \langle z | \varphi_p \rangle = \varphi_m(x) \varphi_n(y) \varphi_p(z) \quad (7.17)$$

où nous avons utilisé une généralisation de l'eq. 7.4 pour exprimer le produit scalaire entre nos triples produits tensoriels.

7.2 Paires de photons intriqués

Appliquons maintenant le formalisme du produit tensoriel au cas d'une paire de photons intriqués. Considérons donc l'état de polarisation d'une paire de photons, chaque photon étant décrit par un espace de Hilbert de dimension 2 engendré par les états de polarisation $|\uparrow\rangle$ et $|\leftrightarrow\rangle$, comme discuté au chapitre 2. L'espace de Hilbert du système, produit tensoriel de deux espaces de dimension 2, est alors de dimension $2 \times 2 = 4$. Il peut être décrit à l'aide de la base tensorielle $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\leftrightarrow\rangle, |\leftrightarrow\uparrow\rangle, |\leftrightarrow\leftrightarrow\rangle\}$. Nous nous intéresserons plus particulièrement à la production et aux propriétés de l'état intriqué

$$|\psi\rangle = \frac{|\uparrow\uparrow\rangle + |\leftrightarrow\leftrightarrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (7.18)$$

Cet état correspond à une paire de photons dont l'état de polarisation est la superposition linéaire des deux photons dans l'état de polarisation vertical et des deux photons dans l'état de polarisation horizontal, comme l'état discuté dans l'introduction à ce chapitre.

7.2.1 Génération de paires de photons intriqués

La méthode de génération de paires de photons intriqués [36] que nous allons discuter ici a été récemment mise en œuvre par des élèves X2021 [7] et X2022 [8] dans le cadre de leurs Projets Scientifiques Collectifs (PSC). Cette méthode repose sur un processus d'optique non-linéaire appelé *génération paramétrique*. Ce processus, schématisé Fig. 7.2, se manifeste par la fission d'un photon d'énergie $\hbar\omega_0$ en deux photons d'énergie $\hbar\omega_0/2$. Il peut se produire dans certains matériaux excités à

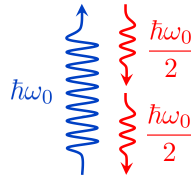


FIGURE 7.2 – *Processus de génération paramétrique, lors duquel un photon d'énergie $\hbar\omega_0$ donne naissance à deux photons d'énergie $\hbar\omega_0/2$. Dans l'expérience décrite ici, la longueur d'onde du faisceau incident est 408 nm et celle des photons émis est donc égale à $2 \times 408 = 816$ nm.*

l'aide d'un faisceau lumineux typiquement produit par un laser. L'état de polarisation et la direction des photons ainsi émis dépend de conditions précises que l'on peut contrôler en utilisant des cristaux non-linéaire biréfringents, comme par exemple le BBO⁽ⁱⁱ⁾ qui sera considéré ici. Lorsque la polarisation du faisceau laser incident est parallèle à ce qu'on appellera pour simplifier l'axe du cristal, on observe l'émission de photons de fréquence moitié, dont la polarisation se trouve être perpendiculaire à celle du faisceau incident. De plus, en raison de ce qu'on appelle les conditions d'accord de phase [37], les photons sont émis ici selon un cône faisant un angle de quelques degrés par rapport à l'axe de propagation du faisceau incident. Dans la suite, nous nous limiterons aux événements de

⁽ⁱⁱ⁾ β -borate de baryum

détection pour lesquels des photons sont effectivement détectés à l'aide de photodiodes placées dans un plan horizontal. Par conservation de l'impulsion totale des photons à l'intérieur du matériau, on sait que si un photon est détecté dans le plan horizontal alors le second photon a également été émis de manière symétrique dans ce même plan. On obtient ainsi la situation représentée Fig. 7.3(a) : un faisceau polarisé horizontalement produit une paire de photons émis de part et d'autre de l'axe du faisceau incident et dans un état de polarisation vertical, soit $|\uparrow\uparrow\rangle$. De même, si comme représenté Fig. 7.3(b) on utilise un faisceau polarisé verticalement et un cristal orienté verticalement, on obtiendra une paire de photons polarisés horizontalement, soit l'état $|\leftrightarrow\leftrightarrow\rangle$. Considérons enfin

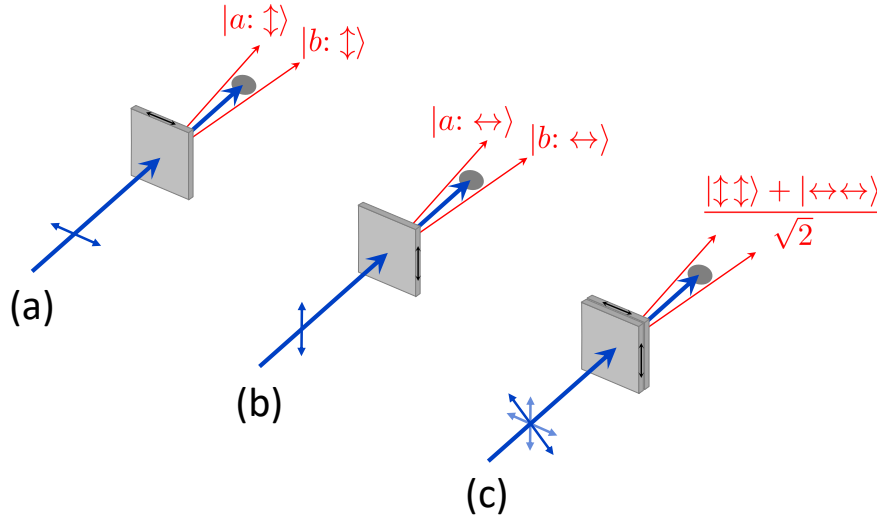


FIGURE 7.3 – Génération d'une paire de photons dans le cas d'un faisceau incident (a) polarisé horizontalement incident sur un cristal aligné horizontalement, (b) polarisé verticalement incident sur un cristal aligné verticalement, (c) polarisé à 45° incident sur un empilement de deux cristaux dont l'un est aligné horizontalement et l'autre verticalement.

la situation représentée Fig. 7.3(c), où le faisceau laser incident est polarisé linéairement à 45° par rapport à la verticale et où on utilise un assemblage de deux cristaux, l'un aligné horizontalement et l'autre verticalement. Sachant que le champ du faisceau incident peut s'écrire comme la superposition de deux champs polarisés linéairement, l'un horizontal et l'autre vertical, le principe de superposition linéaire nous indique que l'état ainsi produit sera la superposition entre les états $|\uparrow\uparrow\rangle$ et $|\leftrightarrow\leftrightarrow\rangle$, c'est-à-dire exactement l'état intriqué $|\psi\rangle$ défini par l'éq. 7.18. Il convient de préciser que la probabilité d'émission paramétrique est très faible, de sorte que la probabilité de détecter deux paires de photons pourra être négligée.

7.2.2 Corrélation des mesures

On suppose que les deux photons produits à l'aide du montage représenté Fig. 7.3(c) sont envoyés à l'aide de miroirs vers deux observateurs appelés Alice et Bob – potentiellement très éloignés l'un de l'autre – disposant de polariseurs leur permettant de mesurer l'état de polarisation des photons, comme schématisé Fig. 7.4.

Plaçons-nous dans le cas où la première mesure est effectuée par Alice. De manière générale, appelons $|\chi\rangle$ l'état associé à sa mesure, ce qui revient à dire que la grandeur physique mesurée est le projecteur $\hat{P}_\chi = |\chi\rangle\langle\chi|$. Cette observable binaire prend la valeur 1 si la mesure donne un état de

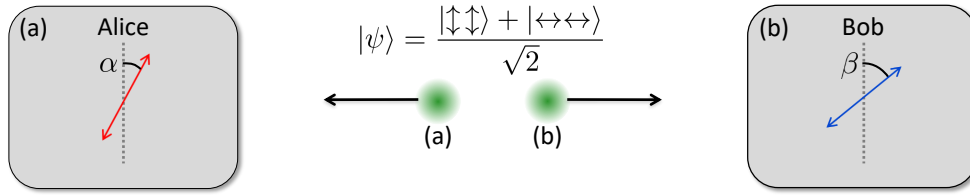


FIGURE 7.4 – Mesure par Alice (a) et Bob (b) de l'état de polarisation d'une paire de photons placée dans l'état intriqué $|\psi\rangle$ donné par l'éq. 7.18. Alice (resp. Bob) utilise un polariseur linéaire faisant un angle α (resp. β) par rapport à la verticale.

polarisation associé à $|\chi\rangle$, et 0 dans le cas d'une polarisation associée au ket orthogonal à $|\chi\rangle$. Dans notre espace de Hilbert de dimension 4, on est en fait dans le cas d'une valeur propre dégénérée. En effet, l'espace propre associé à la valeur propre $P_\chi = 1$ est de dimension 2 puisqu'il est engendré par les états $|\chi\rangle|\uparrow\rangle$ et $|\chi\rangle|\leftrightarrow\rangle$. Selon la procédure décrite en 3.3.3, écrivons l'action du projecteur dans cet espace de dimension 2 sur l'état du système, soit

$$\hat{P}_\chi \otimes \hat{I}_b |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{P}_\chi |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle + \hat{P}_\chi |\leftrightarrow\rangle |\leftrightarrow\rangle \right). \quad (7.19)$$

En utilisant $\hat{P}_\chi |\uparrow\rangle = |\chi\rangle \langle\chi| \uparrow\rangle$ et $\hat{P}_\chi |\leftrightarrow\rangle = |\chi\rangle \langle\chi| \leftrightarrow\rangle$, on obtient

$$\hat{P}_\chi \otimes \hat{I}_b |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle\chi| \uparrow\rangle |\chi\rangle |\uparrow\rangle + \langle\chi| \leftrightarrow\rangle |\chi\rangle |\leftrightarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} |\chi\rangle \otimes (\langle\chi| \uparrow\rangle |\uparrow\rangle + \langle\chi| \leftrightarrow\rangle |\leftrightarrow\rangle). \quad (7.20)$$

Sachant que $|\langle\chi| \uparrow\rangle|^2 + |\langle\chi| \leftrightarrow\rangle|^2 = \langle\chi|\chi\rangle = 1$, on en déduit que $\|\hat{P}_\chi |\psi\rangle\|^2 = 1/2$. La probabilité de mesure est donc égale à 1/2, quel que soit l'état de polarisation mesuré par Alice.

Dans le cas où Alice a effectivement obtenu le résultat $P_\chi = 1$, l'état de l'ensemble du système après la mesure s'obtient en normalisant le vecteur projeté donné par l'éq. 7.20, ce qui nous donne le ket

$$|\psi'\rangle = |\chi\rangle \otimes (\langle\chi| \uparrow\rangle |\uparrow\rangle + \langle\chi| \leftrightarrow\rangle |\leftrightarrow\rangle). \quad (7.21)$$

Ainsi, à l'issue de la mesure effectuée par Alice, le photon (b) se trouve dans un état dont les coefficients sont les complexes conjugués de ceux de l'état $|\chi\rangle$. Supposons maintenant pour simplifier qu'Alice fasse ses mesures à l'aide d'un polariseur linéaire orienté selon l'angle α , comme représenté Fig. 7.4. Cette hypothèse nous permet de remplacer l'état $|\chi\rangle$ par l'état de polarisation linéaire donné par l'éq. 2.22, soit

$$|\alpha\rangle = \cos \alpha |\uparrow\rangle + \sin \alpha |\leftrightarrow\rangle. \quad (7.22)$$

Les coefficients de la décomposition du ket $|\alpha\rangle$ étant réels, on déduit de la forme de l'état $|\psi'\rangle$ que le photon (b) est lui aussi projeté dans l'état $|\alpha\rangle$ après la mesure. L'état du système après la mesure d'Alice s'écrit ainsi $|\psi'\rangle = |\alpha\rangle |\alpha\rangle = |\alpha\alpha\rangle$. Considérons maintenant la mesure effectuée par Bob sur cet état $|\psi'\rangle$. Cette mesure étant effectuée à l'aide d'un polariseur linéaire orienté selon l'angle β , elle est associée au projecteur $\hat{P}_\beta = |\beta\rangle \langle\beta|$. On a

$$\hat{I}_a \otimes \hat{P}_\beta |\alpha\alpha\rangle = |\alpha\rangle \otimes (|\beta\rangle \langle\beta|) |\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle |\alpha\beta\rangle. \quad (7.23)$$

Or

$$\langle \beta | \alpha \rangle = (\cos \beta \langle \uparrow | + \sin \beta \langle \leftrightarrow |) (\cos \alpha | \uparrow \rangle + \sin \alpha | \leftrightarrow \rangle) = (\cos \beta \cos \alpha + \sin \beta \sin \alpha), \quad (7.24)$$

soit

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \cos(\alpha - \beta). \quad (7.25)$$

Ce dernier résultat n'est pas étonnant car il nous donne une probabilité $|\langle \beta | \alpha \rangle|^2 = \cos^2(\alpha - \beta)$ en accord avec la loi de Malus. On en déduit que $\hat{P}_\beta |\alpha\rangle = \cos(\alpha - \beta) |\alpha\beta\rangle$. En évaluant la norme de ce vecteur, on en déduit que la probabilité que Bob mesure la polarisation β sachant qu'Alice avait mesuré la polarisation α est égale à $\cos^2(\alpha - \beta)$. Sachant enfin qu'Alice avait une chance sur deux d'obtenir ce résultat, on en déduit que la probabilité conjointe qu'Alice mesure la polarisation α et Bob mesure la polarisation β est égale à

$$\mathcal{P}(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} \cos^2(\alpha - \beta). \quad (7.26)$$

Remarquons que la probabilité que Bob ait obtenu le résultat β quel que soit le résultat α ou $\alpha + \pi/2$ obtenu par Alice s'écrit

$$\mathcal{P}(\alpha, \beta) + \mathcal{P}(\alpha + \frac{\pi}{2}, \beta) = \frac{1}{2} \cos^2(\alpha - \beta) + \frac{1}{2} \cos^2(\alpha + \frac{\pi}{2} - \beta) = \frac{1}{2} \cos^2(\alpha - \beta) + \frac{1}{2} \sin^2(\alpha - \beta) = \frac{1}{2}. \quad (7.27)$$

Ainsi, Alice et Bob jouent finalement exactement le même rôle : ils ont chacun une chance sur deux d'obtenir l'un ou l'autre des deux résultats possibles. Par ailleurs, la probabilité conjointe $\mathcal{P}(\alpha, \beta) = (1/2) \cos^2(\alpha - \beta)$ est parfaitement symétrique par échange des angles α et β . Notre hypothèse de travail selon laquelle Alice était la première à faire la mesure n'a donc pas de conséquence sur le résultat final, ce qui est heureux. En effet, selon la théorie de la relativité, l'ordre temporel des deux mesures peut dépendre du référentiel choisi pour décrire l'expérience, et il aurait donc été absurde que cet ordre ait une conséquence sur le résultat finalement obtenu.

En résumé, bien que les mesures effectuées par Alice et Bob donnent des résultats parfaitement aléatoires lorsqu'elles sont considérées séparément, on observe une forte corrélation lorsqu'on considère l'ensemble de leurs résultats : par exemple, si Alice et Bob utilisent le même angle α , alors ils obtiendront toujours le même résultat. Afin de mieux représenter cette corrélation, introduisons les grandeurs centrées, $\hat{A} = 2|\alpha\rangle\langle\alpha| - 1$ pour Alice et $\hat{B} = 2|\beta\rangle\langle\beta| - 1$ pour Bob. Ces grandeurs prennent la valeur $+1$ si la mesure donne la polarisation correspondant à l'angle α (resp. β) testé, et la valeur -1 si c'est le résultat correspondant à la polarisation orthogonale qui est obtenu. On peut alors calculer la fonction de corrélation

$$E(\alpha, \beta) = \langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle. \quad (7.28)$$

Sa valeur peut être obtenue en moyennant les 4 résultats possibles, sachant que $AB = 1$ lorsqu'Alice et Bob obtiennent le même résultat et -1 lorsqu'ils obtiennent des résultats différents.

$$E(\alpha, \beta) = \mathcal{P}(\alpha, \beta) - \mathcal{P}(\alpha + \frac{\pi}{2}, \beta) - \mathcal{P}(\alpha, \beta + \frac{\pi}{2}) + \mathcal{P}(\alpha + \frac{\pi}{2}, \beta + \frac{\pi}{2}). \quad (7.29)$$

On en déduit

$$E(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} \cos^2(\alpha - \beta) - \frac{1}{2} \sin^2(\alpha - \beta) - \frac{1}{2} \sin^2(\alpha - \beta) + \frac{1}{2} \cos^2(\alpha - \beta) \quad (7.30)$$

$$= \cos^2(\alpha - \beta) - \sin^2(\alpha - \beta), \quad (7.31)$$

soit

$$E(\alpha, \beta) = \cos 2(\alpha - \beta). \quad (7.32)$$

On en conclut que la fonction de corrélation est égale à 1 lorsque $\beta = \alpha$, soit une corrélation parfaite : Alice et Bob obtiendront toujours le même résultat s'ils utilisent le même angle d'analyse. A l'inverse, la fonction de corrélation vaut -1 lorsque $\beta = \alpha + \pi/2$, soit une anti-corrélation parfaite. Ce résultat est sans surprise puisque tourner le polariseur de Bob de $\pi/2$ revient à échanger les deux polarisations, et donc à changer B en $-B$. Enfin, la fonction de corrélation s'annule lorsque $\beta = \alpha \pm \pi/4$. Si Alice et Bob utilisent des angles différant de 45° , alors il n'y a aucune corrélation entre leurs mesures et les 4 issues possibles sont équiprobables.

7.2.3 Invariance par rotation

Un résultat remarquable associé à l'éq. 7.32 est son invariance par rotation. Le résultat ne dépend que de la différence entre les angles choisis par Alice et Bob, ce qui n'était pas évident *a priori* compte tenu de la forme de l'état $|\psi\rangle$, où la base des états de polarisation horizontale et verticale semble jouer un rôle privilégié. Considérons donc un état similaire à celui donné par l'éq. 7.18, mais construit à partir d'états de polarisation linéaire tourné d'un angle θ , soit l'état intriqué $(|\theta\rangle|\theta\rangle + |\theta + \frac{\pi}{2}\rangle|\theta + \frac{\pi}{2}\rangle)/\sqrt{2}$. Le premier terme de la superposition s'écrit

$$|\theta\rangle|\theta\rangle = (\cos \theta |\uparrow\rangle + \sin \theta |\leftrightarrow\rangle)(\cos \theta |\uparrow\rangle + \sin \theta |\leftrightarrow\rangle) \quad (7.33)$$

$$= \cos^2 \theta |\uparrow\uparrow\rangle + \cos \theta \sin \theta |\uparrow\leftrightarrow\rangle + \cos \theta \sin \theta |\leftrightarrow\uparrow\rangle + \sin^2 \theta |\leftrightarrow\leftrightarrow\rangle \quad (7.34)$$

De même,

$$|\theta + \frac{\pi}{2}\rangle|\theta + \frac{\pi}{2}\rangle = (-\sin \theta |\uparrow\rangle + \cos \theta |\leftrightarrow\rangle)(-\sin \theta |\uparrow\rangle + \cos \theta |\leftrightarrow\rangle) \quad (7.35)$$

$$= \sin^2 \theta |\uparrow\uparrow\rangle - \cos \theta \sin \theta |\uparrow\leftrightarrow\rangle - \cos \theta \sin \theta |\leftrightarrow\uparrow\rangle + \cos^2 \theta |\leftrightarrow\leftrightarrow\rangle \quad (7.36)$$

En ajoutant ces deux expressions puis en divisant par $\sqrt{2}$, on obtient

$$\frac{|\theta\rangle|\theta\rangle + |\theta + \frac{\pi}{2}\rangle|\theta + \frac{\pi}{2}\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|\uparrow\uparrow\rangle + |\leftrightarrow\leftrightarrow\rangle}{\sqrt{2}} = |\psi\rangle. \quad (7.37)$$

On vérifie ainsi explicitement que l'état $|\psi\rangle$ est invariant par rotation et qu'il prend la même forme quel que soit l'angle θ utilisé pour construire la base tensorielle. Ce résultat nous permet aussi de retrouver plus rapidement les résultats établis plus haut : Si Alice utilise l'angle de mesure α , on peut utiliser la base associée aux angles de polarisation α et $\alpha + \pi/2$ pour écrire l'état $|\psi\rangle$. Ce choix permet de voir immédiatement que la probabilité de mesure est égale à $1/2$ et que l'état après la mesure est $|\alpha\alpha\rangle$ si Alice a effectivement observé que son photon était polarisé selon l'angle α . La

loi de Malus nous permet ensuite de calculer la probabilité que Bob mesure la polarisation de son photon selon l'angle β .

7.2.4 Intrication et décohérence

Une conséquence inéluctable de la nature intriquée de l'état $|\psi\rangle$ est qu'il est alors impossible de définir l'état d'une partie du système. Seul l'état quantique du système considéré dans sa globalité a un sens. En effet, mettons-nous à la place d'Alice et essayons d'attribuer un état quantique à la polarisation du seul photon dont elle dispose. On a vu que la probabilité de mesurer un état de polarisation linéaire était égale à $1/2$, quel que soit l'angle α utilisé pour l'analyseur, ce qui signifie que le photon n'est pas dans un état de polarisation linéaire. On pourrait alors être tenté de décrire le système à l'aide d'un état de polarisation circulaire droit $|+\rangle = (|\uparrow\rangle + i|\leftrightarrow\rangle)/\sqrt{2}$, qui donnerait effectivement ce comportement d'une probabilité de mesure égale à $1/2$ et indépendante de l'angle α . Mais on a vu plus haut que pour un état $|\chi\rangle$ arbitraire, y compris un état de polarisation circulaire ou elliptique, on avait $\|\hat{P}_\chi|\psi\rangle\|^2 = 1/2$, ce qui signifie que le résultat de la mesure associée sera toujours totalement aléatoire, avec une probabilité $1/2$ pour chacune des deux issues possibles. Il n'existe donc aucun état quantique $|\chi\rangle$ susceptible de décrire l'état du système restreint à un seul photon.

De plus, considérons une grandeur physique quelconque A associée à une observable $\hat{A}$ agissant sur le seul photon dont dispose Alice. Dans ce cas, la valeur moyenne de A dans l'état intriqué $|\psi\rangle$ peut s'écrire

$$\langle A \rangle = \frac{1}{2} (\langle \uparrow\uparrow | + \langle \leftrightarrow \leftrightarrow |) \hat{A} \otimes \hat{I}_b (|\uparrow\uparrow\rangle + |\leftrightarrow \leftrightarrow\rangle). \quad (7.38)$$

Dans le calcul de cette expression, les termes croisés du type $\langle \leftrightarrow \leftrightarrow | \hat{A} \otimes \hat{I}_b |\uparrow\uparrow\rangle = \langle \leftrightarrow | \hat{A} |\uparrow\rangle \langle \leftrightarrow | \uparrow \rangle$ s'annulent en raison de l'orthogonalité des états de base. Il ne reste donc que les termes diagonaux, ce qui nous donne

$$\langle A \rangle = \frac{1}{2} \langle \uparrow | \hat{A} | \uparrow \rangle + \frac{1}{2} \langle \leftrightarrow | \hat{A} | \leftrightarrow \rangle. \quad (7.39)$$

Ce résultat n'a absolument rien de quantique : il correspond à ce que l'on appelle un *mélange statistique*. Tout se passe comme si on avait la moitié des photons dans l'état $|\uparrow\rangle$ et l'autre moitié dans l'état $|\leftrightarrow\rangle$. Ou encore la moitié des photons dans l'état $|\theta\rangle$ et l'autre moitié dans l'état $|\theta + \frac{\pi}{2}\rangle$ puisque le résultat obtenu, égal à la moitié de la trace de $\hat{A}$, est indépendant de la base choisie. En faisant cela, on gomme complètement la nature quantique de l'état intriqué $|\psi\rangle$, qui est pourtant bien réelle comme le montrent les mesures de corrélation discutées plus haut.

Cette discussion apporte un certain éclairage sur la notion de décohérence, phénomène par lequel la cohérence d'un système quantique peut être partiellement ou totalement dissipée lorsque le système est couplé à l'environnement. Comme on l'a vu dans cet exemple d'une paire de photons, certes un peu extrême, laisser échapper un seul photon fait totalement disparaître la nature quantique du système. En pratique, préserver la nature quantique d'un système physique exige de l'isoler aussi parfaitement que possible de son environnement, ce qui constitue le défi majeur à surmonter dans le cadre de la seconde révolution quantique.

7.3 Violation de l'inégalité de Bell

Revenons à cette belle page de l'histoire de la physique quantique [1, 35], déjà évoquée dans l'introduction de ce chapitre et qui mène du fameux article EPR jusqu'aux expériences ayant définitivement clos le débat entre Bohr et Einstein. Nous reprenons ici les notations introduites par Jean-Louis Basdevant et Jean Dalibard dans leur ouvrage [1], auquel on pourra se référer pour une description plus approfondie.

7.3.1 Théories à variables cachées

Dans l'article EPR, les auteurs s'appuient sur la notion d'état intriqué pour attribuer ce qu'ils appellent un *élément de réalité physique* à l'état de polarisation de chacun des photons. De leur point de vue, on peut en effet connaître l'état de polarisation, $\uparrow$ ou $\leftrightarrow$, du photon de Bob en mesurant l'état du photon d'Alice. Et inversement. Comme EPR excluent – à tort – la possibilité que la mesure effectuée par Alice ou Bob affecte l'état global du système, comme exposé plus haut, ils en concluent que cet élément de réalité physique existait avant la mesure. Cela revient à introduire une variable λ appartenant à un ensemble Λ qui permet de prévoir de manière parfaitement déterministe le résultat des mesures effectuées par Alice ou Bob. C'est seulement parce qu'on ne connaît pas la valeur de λ , appelée *variable cachée*, que l'on a l'impression que le résultat des mesures est aléatoire. Si on considère les grandeurs A et B définies plus haut, on peut introduire les fonctions $A(\lambda, \alpha)$ et $B(\lambda, \beta)$ prenant les valeurs $+1$ ou -1 selon la valeur de λ . Dans le cadre d'une théorie à variables cachées *locale*, on exclut évidemment la possibilité que A puisse dépendre de β ou B de α . La moyenne des mesures effectuées par Alice pour un angle α de son polariseur s'écrit alors

$$\langle A \rangle = \int_{\lambda \in \Lambda} A(\lambda, \alpha) \mathcal{P}(\lambda) d\lambda, \quad (7.40)$$

où $\mathcal{P}(\lambda)$ est une fonction normalisée décrivant la distribution de la variable cachée λ . Ainsi, en choisissant bien cette distribution ainsi que la fonction $A(\lambda, \alpha)$, on peut reproduire le résultat $\langle A \rangle = 0$ de la physique quantique sans accepter pour autant sa nature indéterministe. C'est seulement notre ignorance du véritable état du système, un peu comme en thermodynamique, qui donnerait cette illusion d'indéterminisme, raison pour laquelle EPR considèrent que la physique quantique est incomplète.

7.3.2 Théorème de Bell

De façon assez ironique, c'est en utilisant l'intrication – qui a été mise en exergue pour la première fois justement dans l'article EPR – que Bell montre qu'une théorie à variables cachées locale ne peut rendre compte de toutes les prédictions de la physique quantique lorsqu'on s'intéresse à des mesures impliquant deux particules intriquées [29, 30]. En effet, considérons la fonction de corrélation $E(\alpha, \beta) = \langle AB \rangle$ introduite plus haut. Dans le cadre d'une théorie à variables cachées locale cette fonction s'écrit

$$E(\alpha, \beta) = \int_{\Lambda} A(\lambda, \alpha) B(\lambda, \beta) \mathcal{P}(\lambda) d\lambda. \quad (7.41)$$

Bell introduit alors la quantité

$$S = E(\alpha, \beta) + E(\alpha, \beta') + E(\alpha', \beta) - E(\alpha', \beta'), \quad (7.42)$$

où α et α' sont deux angles choisis successivement par Alice et β et β' sont deux angles choisis successivement par Bob. On peut alors montrer de manière très générale, comme détaillé dans l'annexe B.5, que toute théorie à variables cachées locale implique l'inégalité

$$|S| \leq 2, \quad (7.43)$$

appelée *inégalité de Bell*. Or, selon la physique quantique, nous savons que $E(\alpha, \beta) = \cos 2(\alpha - \beta)$.

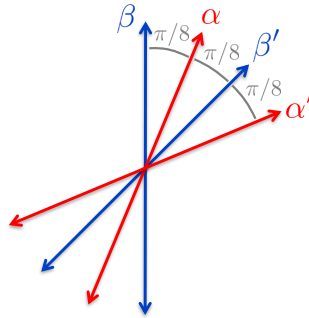


FIGURE 7.5 – Angles utilisés par Alice et Bob pour maximiser la valeur du paramètre S , qui vaut alors $2\sqrt{2}$.

Comme le montre l'annexe B.6, les angles représentés Fig. 7.5, correspondant à $\beta = 0$, $\alpha = \pi/8$, $\beta' = \pi/4$ et $\alpha' = 3\pi/8$, maximisent alors la valeur de S . Pour ce choix, les trois premiers termes de l'éq. 7.42 prennent la valeur $\cos \pi/4 = 1/\sqrt{2}$, tandis que le dernier terme prend la valeur $-\cos(3\pi/4)$, soit à nouveau $1/\sqrt{2}$. Ainsi, on obtient

$$S = \frac{4}{\sqrt{2}} = 2\sqrt{2} \approx 2.83 > 2. \quad (7.44)$$

Cette valeur est clairement supérieure à la valeur limite de 2 prévue par Bell pour une théorie à variables cachées locale.

7.3.3 Le verdict de l'expérience

Des expériences toujours plus précises et plus complètes ont été effectuées pour mettre en évidence la violation de l'inégalité de Bell [31, 32, 33, 34], avec par exemple $S = 2.697$ dans le cas de l'expérience menée à l'Institut d'Optique par Alain Aspect, Philippe Grangier et Gérard Roger [32, 38]. Par la suite, des modulateurs acousto-optiques très rapides ont été utilisés par Alain Aspect, Jean Dalibard et Gérard Roger [33, 38] pour que le choix des angles α et β soit effectué après la génération des photons, excluant toute possibilité de communication et démontrant explicitement la non-localité de la physique quantique. Enfin, le dernier raffinement apporté par Zeilinger *et al.* a consisté à faire ce choix des angles à l'aide d'un générateur aléatoire quantique [34].

Grâce à la source paramétrique discutée en 7.2.1, les premières expériences [31, 32] de la série

évoquée ci-dessus ont pu être reproduites dans le cadre de PSC [7, 8]. La Fig. 7.6 représente ainsi une mesure expérimentale de la fonction $\mathcal{P}(\alpha, \beta = 0)$ effectuée par les élèves X2022 [8], ce qui constitue une belle démonstration de la loi de Malus en régime de photon unique. Les valeurs de S obtenues

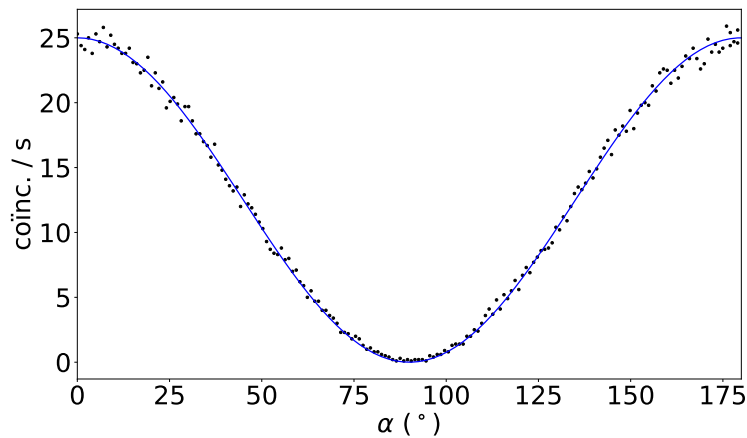


FIGURE 7.6 – Nombre de détections simultanées par seconde pour deux photo-détecteurs, l'un correspondant à l'angle de polarisation α représenté en abscisse et l'autre correspondant à l'angle $\beta = 0$. La courbe en trait plein représente la fonction $\cos^2 \alpha$, multipliée par une amplitude ajustée aux données expérimentales. Extrait de [8].

à l'aide de ce montage expérimental, $S = 2.27$ [7] puis $S = 2.57$ [8], tout en étant légèrement inférieures aux meilleurs résultats publiés, n'en sont pas moins en contradiction indiscutable avec une théorie à variables cachées locale.

La conclusion très claire de ces expériences est donc le triomphe de l'interprétation de Bohr, qui – plus qu'une simple interprétation – est la seule conforme aux faits expérimentaux.

Chapitre 8

Le spin 1/2

Dans les chapitres précédents, nous avons considéré que l'état d'une particule ponctuelle comme l'électron peut être entièrement décrit à l'aide de l'espace de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, ce qui revient à supposer que les degrés de liberté de la particule sont entièrement décrits par sa position dans l'espace. Or, en 1924, pour rendre compte de phénomènes comme l'effet Zeeman anormal, Pauli est amené à postuler l'existence d'un autre degré de liberté pour une particule comme l'électron. Cette nouvelle grandeur ne peut prendre que 2 valeurs, à la manière de la polarisation d'un photon unique étudiée au chapitre 2. Par la suite, Uhlenbeck et Goudsmit attribuent ce nouveau degré de liberté à la rotation de l'électron sur lui-même [39, 40], d'où le nom de *spin* employé pour caractériser cette nouvelle grandeur. Même si cette interprétation est par trop naïve, notamment en raison de la nature ponctuelle de l'électron, ce degré de liberté interne est un objet purement quantique effectivement associé au moment cinétique intrinsèque de l'électron.

Le spin de l'électron peut être mis en évidence de manière très directe par les propriétés magnétiques qui lui sont associées, notamment dans le cadre de l'expérience de Stern et Gerlach [41, 42]. Curieusement, cette expérience effectuée dès 1922 ne fut interprétée correctement que bien plus tard et n'a donc pas joué le rôle historique qu'on aurait pu en attendre dans la découverte du spin. C'est néanmoins en nous appuyant sur cette expérience que nous allons aborder le spin dans ce chapitre.

8.1 Éléments de magnétostatique

8.1.1 Moment magnétique

Rappelons qu'une particule chargée de charge q se déplaçant à une vitesse $\vec{v}$ dans un champ magnétique $\vec{B}$ est soumise à la composante magnétique de la force de Lorentz, soit

$$\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}. \quad (8.1)$$

Selon l'expression ci-dessus, cette force est à la fois perpendiculaire à la vitesse de la particule et au champ magnétique. Considérons maintenant un dipôle magnétique, comme par exemple le circuit électrique circulaire représenté Fig. 8.1, parcouru par un courant i . Les électrons se déplaçant dans le circuit pour induire ce courant seront soumis à une force de Lorentz qui sera transmise au circuit confinant leur mouvement. Toutefois, si on considère deux tronçons de circuit diamétralement

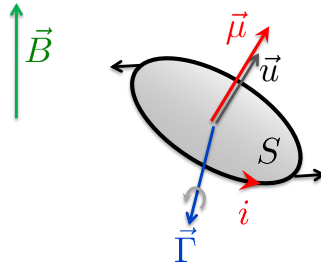


FIGURE 8.1 – Couple exercé sur une spire circulaire de courant électrique placée dans un champ magnétique $\vec{B}$.

opposés, avec en conséquence des vitesses opposées, les forces s'exerçant sur ces tronçons de circuit agiront dans des sens contraires. Si le champ magnétique est inhomogène, les deux forces seront d'amplitudes différentes et il en résultera une force nette exercée sur le circuit. Mais pour un champ homogène, ces deux forces s'annulent et la force nette exercée sur l'ensemble du circuit sera donc nulle. Néanmoins, ces deux forces exercent un couple qui aura tendance à aligner la normale au circuit dans la direction du champ magnétique appliqué. En calculant une intégrale le long du circuit électrique, on peut montrer que le moment du couple exercé sur le circuit s'écrit

$$\vec{\Gamma} = \vec{\mu} \times \vec{B}, \quad (8.2)$$

où $\vec{\mu}$ est le moment magnétique (ou dipôle magnétique) associé au circuit. Pour un circuit plan, le moment magnétique s'écrit

$$\vec{\mu} = iS\vec{u}, \quad (8.3)$$

où i est le courant circulant dans le circuit, S est sa surface, et $\vec{u}$ est un vecteur unitaire normal au plan du circuit. Le circuit étant orienté par rapport au vecteur $\vec{u}$, le courant est positif s'il circule dans le sens direct et négatif dans le cas contraire. Ainsi, comme représenté Fig. 8.1, le couple $\vec{\Gamma}$ est perpendiculaire à la fois au vecteur $\vec{u}$ et au champ magnétique $\vec{B}$.

Rappelons enfin que l'énergie d'un dipôle magnétique placé dans un champ magnétique $\vec{B}$ s'écrit

$$W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (8.4)$$

Cette énergie sera minimale quand $\vec{\mu}$ est aligné avec le champ magnétique, en accord avec l'effet du couple discuté ci-dessus.

8.1.2 Modèle classique du magnétisme atomique

Bien qu'elle soit évidemment vouée à l'échec, tentons tout de même d'élaborer une théorie classique du magnétisme atomique. Pour cela, on adopte une vision simpliste de l'atome d'hydrogène en supposant que l'électron décrit dans le sens direct une trajectoire circulaire autour du proton, comme représenté Fig. 8.2. La période de révolution de l'électron s'écrit $T = 2\pi r/v$, où r est le rayon de l'orbite et v la vitesse de la particule. Si on assimile le système à un circuit électrique similaire à celui représenté Fig. 8.1, on obtient un courant électrique égal à la quantité de charge transportée,

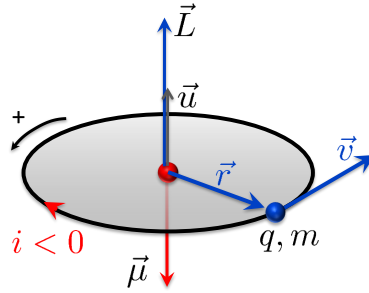


FIGURE 8.2 – Modèle classique de l'atome d'hydrogène, avec un électron de charge q décrivant à la vitesse v une orbite circulaire de rayon r autour du proton.

q , divisée par le temps $T = 2\pi r/v$ mis par l'électron pour parcourir son orbite. On obtient donc

$$i = \frac{q}{T} = \frac{qv}{2\pi r}. \quad (8.5)$$

Remarquons que le courant est négatif car la charge q de l'électron est négative. Le moment magnétique de l'atome s'écrit alors

$$\vec{\mu} = iS\vec{u} = \frac{qv}{2\pi r}\pi r^2\vec{u} = \frac{qrv}{2}\vec{u}. \quad (8.6)$$

Calculons maintenant le moment cinétique $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ de l'électron. Le rayon $\vec{r}$ étant toujours perpendiculaire à la vitesse $\vec{v}$ dans le cas de l'orbite circulaire considérée ici, le moment cinétique sera simplement égal à

$$\vec{L} = rmv\vec{u}. \quad (8.7)$$

En comparant les éq. 8.6 et 8.7 décrivant respectivement le moment magnétique et le moment cinétique, on observe que ces deux grandeurs sont proportionnelles, soit

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2m}\vec{L} = \gamma_0\vec{L}. \quad (8.8)$$

Le coefficient de proportionnalité, $\gamma_0 = q/(2m)$, est indépendant des paramètres de l'orbite. On l'appelle le *rapport gyromagnétique classique*. On peut montrer que cette relation de proportionnalité entre moment cinétique et moment magnétique se généralise à toute distribution de charge, au moins dans le cadre de la physique classique. On peut en déduire qu'une mesure du moment magnétique $\vec{\mu}$ donne en fait accès au moment cinétique $\vec{L}$.

8.1.3 Précession de Larmor

Considérons maintenant l'action d'un champ magnétique homogène sur un atome dans le cadre de la vision classique développée ci-dessus. Selon le théorème du moment cinétique, on peut écrire

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\Gamma} = \vec{\mu} \times \vec{B} = \gamma_0\vec{L} \times \vec{B}, \quad (8.9)$$

où l'on a utilisé la proportionnalité entre moment cinétique et moment magnétique. On en déduit la relation

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = -\gamma_0\vec{B} \times \vec{L}. \quad (8.10)$$

Remarquons tout d'abord que cette équation implique que la projection du moment cinétique le long du champ magnétique se conserve, car $d\vec{L}/dt$ est perpendiculaire à $\vec{B}$. On a donc $d(\vec{L} \cdot \vec{B})/dt = 0$, ce qui est aussi une conséquence directe de la conservation de l'énergie $W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma_0 \vec{L} \cdot \vec{B}$.

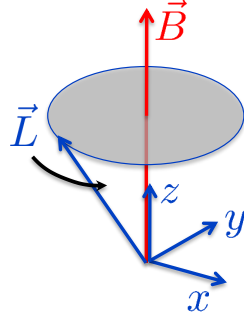


FIGURE 8.3 – *Phénomène de précession de Larmor. Le moment cinétique décrit un mouvement de précession autour du champ magnétique à la fréquence de Larmor $\omega_0 = -\gamma_0 B$.*

Choisissons l'axe z le long du champ magnétique $\vec{B}$. L'éq. 8.10 devient alors

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega_0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\omega_0 L_y \\ \omega_0 L_x \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.11)$$

où l'on a introduit la grandeur $\omega_0 = -\gamma_0 B$, appelée *fréquence de Larmor*. Sachant que γ_0 est négatif pour un électron en raison de sa charge négative, on a $\omega_0 > 0$. On retrouve bien entendu la conservation de L_z déjà évoquée plus haut. Les composantes du moment cinétique dans le plan xy obéissent au système d'équations

$$\begin{cases} \frac{dL_x}{dt} = -\omega_0 L_y \\ \frac{dL_y}{dt} = \omega_0 L_x \end{cases} \quad (8.12)$$

ce que l'on peut encore écrire

$$\frac{d}{dt} (L_x + iL_y) = i\omega_0 (L_x + iL_y), \quad (8.13)$$

dont la solution s'écrit

$$L_x(t) + iL_y(t) = e^{i\omega_0 t} (L_x(0) + iL_y(0)). \quad (8.14)$$

Le nombre $L_x + iL_y$ décrit donc un cercle dans le plan complexe à la fréquence de Larmor ω_0 , ce que l'on peut encore écrire

$$\begin{cases} L_x = L_\perp \cos(\omega_0 t + \varphi) \\ L_y = L_\perp \sin(\omega_0 t + \varphi) \end{cases} \quad (8.15)$$

où $L_\perp$ est la projection du moment cinétique initial dans le plan xy et φ est une phase dépendant des conditions initiales. On obtient donc le mouvement de précession représenté Fig. 8.3, phénomène appelé *précession de Larmor*. La composante du moment cinétique parallèle au champ magnétique se conserve tandis que les composantes transverses du moment cinétique décrivent dans le plan xy un mouvement circulaire parcouru dans le sens direct.

8.2 L'expérience de Stern et Gerlach

Nous disposons maintenant des éléments nécessaires pour discuter l'expérience de Stern et Gerlach [41, 42]. Celle-ci a été effectuée pour la première fois avec des atomes d'argent mais elle a été répétée quelques années plus tard avec des atomes d'hydrogène [43]. Nous supposons donc pour simplifier que nos atomes n'ont qu'un seul électron⁽ⁱ⁾. La motivation initiale de l'expérience était de mettre en évidence la *quantification spatiale*, notion déduite du modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène et que l'on pourrait traduire en termes plus modernes par la quantification du moment cinétique. Le moment magnétique étant, d'après l'éq. 8.8, proportionnel au moment cinétique, on s'attend à ce qu'une mesure du moment magnétique révèle cette quantification.

La Fig. 8.4 représente le montage expérimental. Un jet d'atomes d'argent est envoyé dans l'entrefer d'un aimant dans lequel règne un champ magnétique. Ce dernier, allant du pôle nord vers le pôle sud, est grossièrement aligné selon l'axe z et est orienté vers le bas. On peut donc s'attendre à ce que le moment magnétique porté par les atomes effectue un mouvement de précession de Larmor autour de l'axe z , comme discuté en 8.1.3. Dans les conditions de l'expérience, le champ magnétique a pour valeur $B_0 \approx 0.1$ T, ce qui permet de calculer une fréquence de Larmor $\omega_0/(2\pi) \approx 1.4$ GHz (sachant que $\gamma_0/(2\pi) \approx -14$ GHz/T). Compte tenu de la vitesse des atomes, de l'ordre de quelques centaines de m/s, et de la longueur de l'aimant, de l'ordre de quelques cm, on peut calculer que les atomes mettront une centaine de μs pour traverser l'aimant. Pendant cet intervalle de temps, on pourra donc compter environ 10^5 périodes du mouvement de précession de Larmor. Compte tenu de ce grand nombre d'oscillations, il est légitime de considérer que les valeurs moyennes de μ_x et μ_y seront nulles, tandis que μ_z gardera sa valeur initiale. Par ailleurs, l'intérêt du dispositif est que le champ magnétique est inhomogène, comme en atteste la forme des lignes de champ, plus resserrées près du pôle nord de l'aimant. L'énergie magnétique $W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}(\vec{r})$ dépend donc de la position, ce qui va induire une force dérivant de cette énergie potentielle

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}W(\vec{r}) = \sum_{\alpha=x,y,z} \mu_\alpha \vec{\nabla}B_\alpha(\vec{r}). \quad (8.16)$$

Compte tenu de l'oscillation rapide de μ_x et μ_y , les termes correspondants ne contribueront pas de manière efficace à la force exercée sur les atomes, de sorte que l'on pourra simplement écrire

$$\vec{F} \approx \mu_z \vec{\nabla}B_z(\vec{r}). \quad (8.17)$$

Par symétrie le gradient de B_z au centre de l'aimant est aligné avec l'axe z , et est orienté vers le bas car le champ magnétique décroît avec z (le champ est plus intense près du pôle nord mais il ne faut pas oublier qu'il est négatif). On en déduit que les atomes subiront une force proportionnelle à μ_z , orientée vers le bas si μ_z est positif et vers le haut si μ_z est négatif. En traitant le mouvement des atomes à l'aide de la mécanique classique, on peut donc s'attendre à une trajectoire parabolique à l'intérieur de l'aimant, avec un angle de déflexion en sortie du dispositif proportionnel à μ_z . La position du point d'impact sur l'écran situé en aval de l'aimant est donc directement proportionnelle à μ_z .

⁽ⁱ⁾Cette hypothèse est compatible avec la structure électronique de l'Argent, $[\text{Kr}]4d^{10}5s^1$, avec un électron célibataire sur la couche 5s.

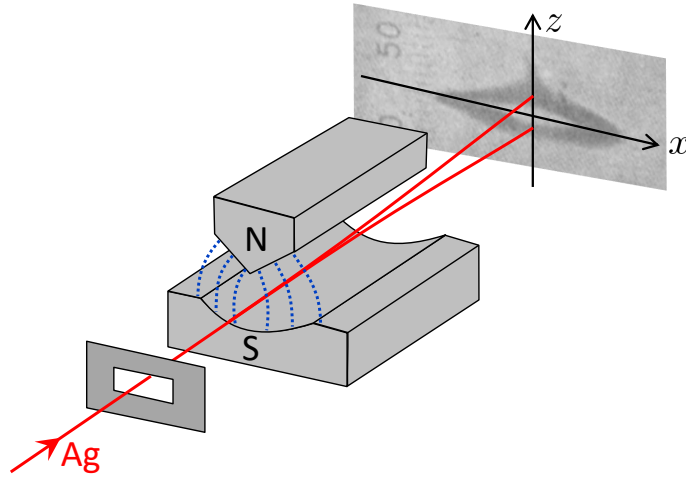


FIGURE 8.4 – *Expérience de Stern et Gerlach [41, 42]. L'image du clivage observé sur l'écran est évidemment très agrandie par rapport à sa taille réelle.*

Comme le montre la Fig. 8.4, le résultat de l'expérience montre un clivage clair du faisceau d'atomes d'argent, avec deux taches séparées de quelques mm⁽ⁱⁱ⁾. Ce clivage révèle une quantification du moment magnétique. De plus, le résultat expérimental donne effectivement la valeur attendue $\mu_z = \pm(q/2m)\hbar$, en accord avec le modèle de Bohr supposant un moment cinétique de $\pm\hbar$ selon l'orientation de l'orbite de l'électron. L'expérience est donc considérée comme un succès démontrant de manière spectaculaire la quantification du moment cinétique.

Ce n'est que quelques années plus tard, après l'avènement véritable de la physique quantique, que l'interprétation de l'expérience est remise en question [44]. En effet, la notion de trajectoire circulaire utilisée par le modèle de Bohr est évidemment inadaptée pour décrire l'état fondamental de l'atome d'hydrogène. Ce dernier est en réalité associé à une fonction d'onde invariante par rotation donnant lieu à un moment cinétique nul. Le moment cinétique $\vec{L}$ lié au mouvement de l'électron autour du noyau, qu'on appellera dorénavant *moment cinétique orbital*, ne peut donc expliquer le magnétisme atomique révélé par l'expérience. Il faut donc invoquer le *moment cinétique intrinsèque*, ou *spin*, de l'électron⁽ⁱⁱⁱ⁾ pour expliquer l'expérience. Compte tenu de l'observation de deux tâches, indiquant deux valeurs possibles de μ_z , on en déduit que la composante du spin selon l'axe z , notée S_z , prend elle aussi deux valeurs possibles. Mais ces deux valeurs ne sont pas $\pm\hbar$ mais $\pm\hbar/2$, raison pour laquelle on parle de spin 1/2. L'accord quantitatif obtenu par Stern et Gerlach est en fait fortuit car le rapport gyromagnétique de l'électron, γ_e , est environ deux fois plus grand que celui prévu par la physique classique. On aura donc

$$\mu_z = \gamma_e S_z \quad (8.18)$$

avec

$$\gamma_e \approx \frac{q}{m} \quad (8.19)$$

⁽ⁱⁱ⁾ Le gradient de champ magnétique est plus faible sur les bords de l'aimant, ce qui explique que les deux taches se rejoignent sur les bords de l'image.

⁽ⁱⁱⁱ⁾ On ne considère pas ici le noyau car en raison du rapport gyromagnétique inversement proportionnel à la masse on s'attend à un moment magnétique beaucoup plus faible que pour l'électron. On reviendra sur le spin du noyau au chapitre 9.

et

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2}. \quad (8.20)$$

Pour résumer, on peut interpréter l'expérience dans le cadre d'un espace des états de dimension 2, comme celui étudié au chapitre 2, et considérer l'observable $\hat{S}_z$ associée à la mesure du spin selon l'axe z . L'appareil de Stern et Gerlach est donc un appareil de mesure de S_z : une détection de l'atome en haut correspond à la valeur $S_z = +\hbar/2$ tandis qu'une détection de l'atome en bas correspond à la valeur $S_z = -\hbar/2$. Le dispositif représenté Fig. 8.4 est donc parfaitement similaire au polariseur à deux voies représenté Fig. 2.7 pour mesurer l'état de polarisation d'un photon.

8.3 Construction des observables $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ et $\hat{S}_z$.

On se place donc dans un espace des états de dimension 2. Appelons $|+\rangle_z$ et $|-\rangle_z$ les vecteurs propres de l'observable $\hat{S}_z$ pour les valeurs propres respectives $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$. Ainsi, la matrice de l'observable $\hat{S}_z$ s'écrit dans cette base selon l'expression

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8.21)$$

Intéressons nous maintenant à l'observable $\hat{S}_x$, correspondant à la valeur du spin selon l'axe x , que l'on pourrait par exemple mesurer en tournant l'appareil de Stern et Gerlach de 90° autour de son axe afin que le gradient de champ magnétique soit appliqué selon l'axe x . L'axe z ne jouant pas de rôle particulier, on peut supposer que les valeurs propres de $\hat{S}_x$ seront également $\pm\hbar/2$. Supposons que le système soit placé dans l'état $|+\rangle_z$ et considérons la valeur moyenne de S_x . Par symétrie, il n'y a aucune raison de privilégier l'un des deux sens de l'axe x , ce dernier étant perpendiculaire à l'axe z . On peut donc raisonnablement supposer que ${}_z\langle +|\hat{S}_x|+\rangle_z = 0$. De même, ${}_z\langle -|\hat{S}_x|-\rangle_z = 0$. On en déduit que les éléments de matrice diagonaux de la matrice représentant $\hat{S}_x$ dans la base $\{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$ sont nuls, ce qui nous permet d'écrire cette matrice sous la forme

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi_x} \\ e^{i\phi_x} & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.22)$$

Pour obtenir cette expression, nous avons simplement utilisé le fait que les deux éléments de matrice non diagonaux étaient complexes conjugués l'un de l'autre et que le déterminant de la matrice était égal au produit des valeurs propres, soit $-\hbar^2/4$. A ce stade, la phase ϕ_x reste indéterminée. Mais en fait, la phase d'un élément de matrice non diagonal est entièrement déterminée par le choix de phase des vecteurs de base. En effet, considérons le ket $|-\rangle'_z = e^{i\phi} |-\rangle_z$, qui est comme $|-\rangle_z$ vecteur propre de $\hat{S}_z$ pour la valeur propre $-\hbar/2$. On peut alors écrire

$${}_z\langle -|\hat{S}_x|+\rangle_z = {}_z\langle -|\hat{S}_x|+\rangle_z e^{-i\phi} = \frac{\hbar}{2} e^{i(\phi_x - \phi)}. \quad (8.23)$$

Il suffit donc de choisir $\phi = \phi_x$ pour que l'élément de matrice soit réel. On voit donc que la phase des éléments de matrice non diagonaux de $\hat{S}_x$ est une simple affaire de convention. Il suffit de choisir comme base propre de $\hat{S}_z$ la base $\{|+\rangle_z, |-\rangle'_z\}$, que nous appellerons dorénavant $\{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$, pour

que les éléments de matrice de $\hat{S}_x$ soient réels. On écrira donc

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.24)$$

On vérifie facilement que les combinaisons linéaires symétrique et antisymétriques des deux vecteurs de base sont vecteurs propres de $\hat{S}_x$. On a en effet

$$\begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ \pm 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \pm 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \pm \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ \pm 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (8.25)$$

On en déduit que les vecteurs propres de l'opérateur $\hat{S}_x$ associés respectivement aux valeurs propres $\hbar/2$ et $-\hbar/2$ peuvent s'écrire

$$|+\rangle_x = \frac{|+\rangle_z + |-\rangle_z}{\sqrt{2}} \quad (8.26)$$

$$|-\rangle_x = \frac{|+\rangle_z - |-\rangle_z}{\sqrt{2}} \quad (8.27)$$

Considérons enfin la troisième composante cartésienne du spin, correspondant à l'observable $\hat{S}_y$. Un raisonnement similaire à celui effectué plus haut pour S_x nous permet d'écrire directement

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi_y} \\ e^{i\phi_y} & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.28)$$

La base $\{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$ étant déjà fixée par notre choix de décrire $\hat{S}_x$ par une matrice réelle, il ne nous est pas possible d'annuler la valeur de ϕ_y comme nous l'avons fait auparavant pour ϕ_x . Nous pouvons par contre tenter de déterminer cette valeur, qui n'est plus un paramètre libre. Pour cela, nous pouvons effectuer une permutation circulaire des trois axes sur la relation ${}_z\langle +|\hat{S}_x|+\rangle_z = 0$ utilisée plus haut, ce qui nous donne ${}_x\langle +|\hat{S}_y|+\rangle_x = 0$. En utilisant l'expression de $|+\rangle_x$ établie plus haut, on obtient

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi_y} \\ e^{i\phi_y} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \begin{pmatrix} e^{-i\phi_y}/\sqrt{2} \\ e^{i\phi_y}/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cos \phi_y = 0. \quad (8.29)$$

On en déduit que $\phi_y = \pm\pi/2$. Les deux valeurs ne sont pas équivalentes car changer ϕ_y de $\pi/2$ en $-\pi/2$ revient à changer $\hat{S}_y$ en $-\hat{S}_y$, ce qui revient en fait à changer le signe de l'axe des y . A ce stade, il n'est pas encore possible de choisir entre ces deux possibilités, mais nous admettrons que le bon choix est $\phi_y = \pi/2$. Nous pourrions vérifier que ce choix est correct quand nous étudierons en 9.1.3 la précession de Larmor dans le cadre de la physique quantique. Nous verrons alors que le choix $\phi_y = \pi/2$ nous permettra de retrouver un sens de précession conforme à la fois à l'expérience et à la physique classique, alors que le choix $\phi_y = -\pi/2$ aurait produit une précession dans le mauvais sens. En conclusion, on peut écrire

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.30)$$

On vérifie facilement que les vecteurs propres de $\hat{S}_y$ pour les valeurs propres $\hbar/2$ et $-\hbar/2$ s'écrivent

$$|+\rangle_y = \frac{|+\rangle_z + i|-\rangle_z}{\sqrt{2}} \quad (8.31)$$

$$|-\rangle_y = \frac{|+\rangle_z - i|-\rangle_z}{\sqrt{2}} \quad (8.32)$$

Les trois matrices ainsi obtenues pour $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ et $\hat{S}_z$ sont proportionnelles aux matrices ci-dessous appelées matrices de Pauli et définies par

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8.33)$$

Les composantes cartésiennes du spin s'exprime alors $\hat{S}_\alpha = (\hbar/2)\hat{\sigma}_\alpha$, avec $\alpha = x, y$, ou z . On peut remarquer que les matrices de Pauli ne commutent pas entre elles. En effet,

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \quad (8.34)$$

tandis que

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}. \quad (8.35)$$

En prenant la différence entre ces deux équations on obtient le commutateur

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z. \quad (8.36)$$

En multipliant cette égalité par $(\hbar/2)^2$, on en déduit

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z. \quad (8.37)$$

Par permutation circulaire, on obtient les deux autres relations

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x \quad (8.38)$$

et

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y. \quad (8.39)$$

On retrouve ici les mêmes relations de commutation que celles obtenues en 4.4 pour le moment cinétique orbital d'une particule ponctuelle. Ce résultat confirme que le spin est bien une observable de type moment cinétique, qui représente en fait le moment cinétique intrinsèque de notre particule.

Le fait que les observables associées aux composantes cartésiennes du spin ne commutent pas entre elles signifie qu'il ne sera pas possible de construire de base propre commune à ces trois observables. Les grandeurs physiques correspondantes sont donc incompatibles et il ne sera pas possible de les mesurer simultanément. Par exemple, si on effectue une mesure de S_z et qu'on obtient le résultat $+\hbar/2$, le système se retrouve dans l'état $|+\rangle_z$. Une mesure ultérieure de $\hat{S}_x$ donnera les résultats $\pm\hbar/2$ avec des probabilités $1/2$, le système se trouvant alors dans l'état $|\pm\rangle_x$. Dans ce nouvel état, l'information sur S_z obtenue lors de la première mesure est totalement effacée,

puisque une nouvelle mesure de S_z donnerait à nouveau les résultats $\pm\hbar/2$ avec des probabilités 1/2.

8.4 Mesure du spin selon un axe arbitraire

Maintenant que nous avons établi la forme des observables associées aux trois composantes cartésiennes de l'observable de spin $\hat{\vec{S}}$, intéressons nous à la projection du spin selon un vecteur unitaire $\vec{u}$ arbitraire, défini par ses coordonnées sphériques θ et φ comme représenté Fig. 8.5.

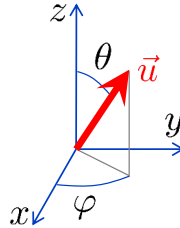


FIGURE 8.5 – Représentation d'un vecteur unitaire $\vec{u}$, défini en coordonnées sphériques à l'aide de la colatitude $\theta \in [0, \pi]$ et de la longitude $\varphi \in [0, 2\pi]$.

On peut donc écrire

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (8.40)$$

La projection du spin selon le vecteur $\vec{u}$ s'écrit alors

$$\hat{\vec{S}} \cdot \vec{u} = \hat{S}_x u_x + \hat{S}_y u_y + \hat{S}_z u_z \quad (8.41)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (8.42)$$

soit

$$\hat{\vec{S}} \cdot \vec{u} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (8.43)$$

Comme les observables associées aux trois composantes cartésiennes du spin, la matrice de $\hat{\vec{S}} \cdot \vec{u}$ a une trace nulle et un déterminant égal à $-\hbar^2/4$. Ses valeurs propres sont donc elles-aussi égales à $\pm\hbar/2$, ce qui n'est pas surprenant. En effet, en raison de l'invariance par rotation, la projection du spin selon un vecteur arbitraire doit avoir les mêmes valeurs possibles que les projections selon n'importe lequel des axes du repère cartésien xyz . Cherchons donc les vecteurs propres associés $|\pm\rangle_{\vec{u}}$, définis par la relation

$$\hat{\vec{S}} \cdot \vec{u} |\pm\rangle_{\vec{u}} = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle_{\vec{u}}. \quad (8.44)$$

Avant de diagonaliser la matrice hermitienne donnée par l'éq. 8.43, rappelons notre remarque mentionnée plus haut selon laquelle le facteur de phase apparaissant dans les éléments de matrice non diagonaux est relié à la phase relative des deux vecteurs de base. Considérons donc la nouvelle base constituée des vecteurs

$$|\pm\rangle'_z = \exp(\mp i\varphi/2) |\pm\rangle_z. \quad (8.45)$$

En utilisant ${}_z'\langle +| = \exp(i\varphi/2) {}_z\langle +|$, on obtient

$${}_z'\langle +|\hat{S} \cdot \vec{u}|- \rangle'_z = e^{i\varphi/2} {}_z\langle +|\hat{S} \cdot \vec{u}|- \rangle_z e^{i\varphi/2} = \frac{\hbar}{2} e^{i\varphi} e^{-i\varphi} \sin \theta = \frac{\hbar}{2} \sin \theta. \quad (8.46)$$

On obtiendrait évidemment le même résultat pour l'élément de matrice conjugué ${}_z'\langle -|\hat{S} \cdot \vec{u}|+ \rangle'_z$. Quant aux éléments de matrice diagonaux, les termes de phase provenant du bra et du ket se neutralisent. Finalement, la matrice de l'observable $\hat{S} \cdot \vec{u}$ dans la base $\{|+\rangle'_z, |-\rangle'_z\}$ s'écrit $(\hbar/2)\hat{M}$ avec

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (8.47)$$

Il s'agit d'une matrice orthogonale associée à une symétrie par rapport à une droite dans le plan euclidien. En effet, avec une trace nulle et un déterminant égal à -1 , les valeurs propres sont ± 1 . Le vecteur propre associé à la valeur propre $+1$ est aligné avec l'axe de la symétrie, tandis que le vecteur propre associé à la valeur propre -1 , changé en son opposé sous l'action de $\hat{M}$, est perpendiculaire à l'axe de la symétrie. La première colonne de la matrice nous donne $\hat{M}|+\rangle'_z = \cos \theta |+\rangle'_z + \sin \theta |-\rangle'_z$. Comme le montre la Fig. 8.6, on peut en déduire que l'axe de la symétrie est selon la bissectrice,

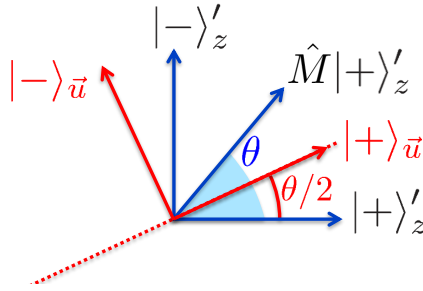


FIGURE 8.6 – Représentation dans la base $\{|+\rangle'_z, |-\rangle'_z\}$ de l'image du vecteur $|+\rangle'_z$ sous l'action de la matrice $\hat{M}$.

correspondant à un angle $\theta/2$. On en déduit

$$|+\rangle_{\vec{u}} = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle'_z + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle'_z \quad (8.48)$$

Le vecteur orthogonal

$$|-\rangle_{\vec{u}} = -\sin \frac{\theta}{2} |+\rangle'_z + \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle'_z \quad (8.49)$$

est perpendiculaire à l'axe de symétrie et correspond donc à la valeur propre -1 . En revenant dans la base initiale, on obtient les vecteurs propres de $\hat{S} \cdot \vec{u}$:

$$|+\rangle_{\vec{u}} = e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle_z + e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle_z \quad (8.50)$$

$$|-\rangle_{\vec{u}} = -e^{-i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} |+\rangle_z + e^{i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle_z. \quad (8.51)$$

Calculons maintenant la valeur moyenne de $\hat{S}$ lorsque le système est dans l'état $|+\rangle_{\vec{u}}$. On peut écrire

$$\vec{u}\langle +|\hat{S}_x|+\rangle_{\vec{u}} = \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2}, e^{-i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (8.52)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2}, e^{-i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (8.53)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \left(e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} + e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \right) \quad (8.54)$$

soit

$$\vec{u}\langle +|\hat{S}_x|+\rangle_{\vec{u}} = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi. \quad (8.55)$$

De même,

$$\vec{u}\langle +|\hat{S}_y|+\rangle_{\vec{u}} = \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2}, e^{-i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (8.56)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2}, e^{-i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -ie^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \\ ie^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (8.57)$$

$$= \frac{\hbar}{2i} \left(e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} - e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \right) \quad (8.58)$$

soit

$$\vec{u}\langle +|\hat{S}_y|+\rangle_{\vec{u}} = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi. \quad (8.59)$$

On peut procéder de même pour S_z , ou plus simplement remarquer que la probabilité de mesurer $+\hbar/2$ est égale à $|{}_z\langle +|+\rangle_{\vec{u}}|^2 = \cos^2 \theta/2$ tandis que celle de mesurer $-\hbar/2$ est égale à $|{}_z\langle -|+\rangle_{\vec{u}}|^2 = \sin^2 \theta/2$. D'où

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} - \frac{\hbar}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{\hbar}{2} \cos \theta \quad (8.60)$$

On reconnaît dans $\langle \vec{S} \rangle$ les trois composantes cartésiennes du vecteur unitaire $\vec{u}$, soit

$$\vec{u}\langle +|\vec{S}|+\rangle_{\vec{u}} = \frac{\hbar}{2} \vec{u}. \quad (8.61)$$

Le calcul effectué ci-dessus pour évaluer les valeurs moyennes de $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ et $\hat{S}_z$ n'est pas inutile car il permet de se familiariser avec la manipulation des matrices 2×2 associées. Toutefois, il était possible d'établir le même résultat bien plus simplement en remarquant que, le système étant invariant par rotation, on aurait pu appeler z la direction correspondant au vecteur $\vec{u}$. Or nous savons que lorsque le système est dans l'état $|+\rangle_z$ on a $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$ et $\langle S_z \rangle = \hbar/2$. Donc $\langle \vec{S} \rangle$ est un vecteur de longueur $\hbar/2$ pointant dans la direction de l'axe z . Soit, de manière générale, $\langle \vec{S} \rangle = (\hbar/2)\vec{u}$ lorsque le système est placé dans l'état $|+\rangle_{\vec{u}}$.

Considérons enfin la mesure du spin selon un vecteur unitaire $\vec{u}$ lorsque le système est préparé dans l'état $|+\rangle_z$. La Fig. 8.7 représente la mise en œuvre expérimentale lorsque le vecteur $\vec{u}$ est dans le plan xz , soit $\varphi = 0$. Un premier appareil de Stern et Gerlach orienté selon l'axe z clive le faisceau incident en deux. En bloquant le faisceau dévié vers le bas, on sélectionne les atomes d'argent se trouvant dans l'état $|+\rangle_z$. Puis un second appareil de Stern et Gerlach orienté selon un axe faisant un angle θ effectue une mesure selon le vecteur unitaire $\vec{u}$ (avec ici $\varphi = 0$). Ce second dispositif

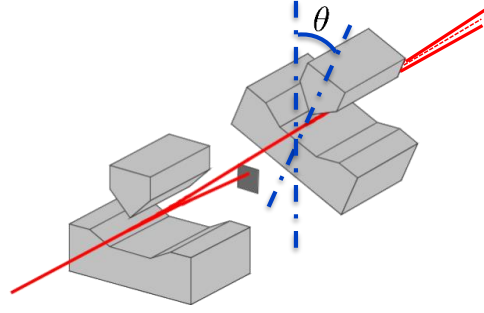


FIGURE 8.7 – Préparation du système dans l'état $|+\rangle_z$ à l'aide d'un premier appareil de Stern et Gerlach puis mesure du spin selon l'angle θ à l'aide d'un second appareil de Stern et Gerlach.

correspond à une mesure de la grandeur $\vec{S} \cdot \vec{u}$, pouvant donner comme résultats de mesure $\pm\hbar/2$. Sachant que les vecteurs propres associés à ces deux résultats sont les vecteurs $|\pm\rangle_{\vec{u}}$, on peut en déduire que la probabilité de mesurer $+\hbar/2$ s'écrit

$$\mathcal{P}_{\vec{u}}(+\hbar/2) = |\vec{u}\langle +|+\rangle_z|^2 = \left| e^{i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} \right|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2}, \quad (8.62)$$

où nous avons utilisé l'éq. 8.50 pour exprimer l'état $|+\rangle_{\vec{u}}$. On obtient de même la probabilité complémentaire d'obtenir le résultat $-\hbar/2$

$$\mathcal{P}_{\vec{u}}(-\hbar/2) = |\vec{u}\langle -|+\rangle_z|^2 = \left| -e^{-i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \right|^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (8.63)$$

où nous avons utilisé l'éq. 8.51 pour exprimer l'état $|-\rangle_{\vec{u}}$. On obtient ainsi dans le cas d'une particule de spin 1/2 l'analogue de la loi de Malus discutée en 2.3. On remarquera le facteur 1/2 obtenu ici, que l'on peut attribuer au fait qu'une particule de spin 1/2 porte un moment cinétique $\pm\hbar/2$ alors qu'un photon porte un moment cinétique $\pm\hbar$.

8.5 Description complète de l'état d'une particule de spin 1/2

Nous avons jusqu'ici considéré uniquement l'état de spin des atomes d'argent intervenant dans l'expérience de Stern et Gerlach. Toutefois, l'état quantique complet de ces atomes doit aussi prendre en compte leur mouvement dans l'espace. En nous appuyant sur le formalisme du produit tensoriel introduit au chapitre précédent, nous pouvons donc considérer un atome d'argent comme un système composite faisant intervenir d'une part des degrés de liberté dit *externes*, correspondant à la position de l'atome dans l'espace, et d'autre part un degré de liberté dit *interne*, correspondant au spin 1/2 discuté dans ce chapitre. On pourra donc écrire l'espace des états sous la forme

$$\mathcal{E}_H = \mathcal{E}_{\text{externe}} \otimes \mathcal{E}_{\text{spin}}, \quad (8.64)$$

où $\mathcal{E}_{\text{externe}}$ correspond à $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ et permet de décrire le mouvement de l'atome dans l'espace à l'aide d'une fonction d'onde $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$, $\vec{r}$ étant la position de l'atome, tandis que $\mathcal{E}_{\text{spin}}$ est l'espace de dimension 2 introduit plus haut et décrivant l'état de spin.

Donnons-nous une base dénombrable $\{|\psi_n\rangle\}$ de $\mathcal{E}_{\text{externe}}$ et écrivons la forme générale d'un état $|\Psi\rangle$ de $\mathcal{E}_H$ en nous inspirant de l'éq. 7.1 pour décomposer cet état dans la base tensorielle $\{|\psi_n\rangle \otimes |\pm\rangle_z\}$. On obtient alors

$$|\Psi\rangle = \sum_{n,\sigma=\pm} c_{n,\sigma} |\psi_n\rangle \otimes |\sigma\rangle_z, \quad (8.65)$$

ce que l'on peut encore écrire sous la forme

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_{n,+} |\psi_n\rangle \otimes |+\rangle_z + \sum_n c_{n,-} |\psi_n\rangle \otimes |-\rangle_z. \quad (8.66)$$

Il est donc toujours possible d'écrire l'état $|\Psi\rangle$ du système sous la forme

$$|\Psi\rangle = |\psi_+\rangle \otimes |+\rangle_z + |\psi_-\rangle \otimes |-\rangle_z, \quad (8.67)$$

où nous avons introduit les kets $|\psi_{\pm}\rangle \in \mathcal{E}_{\text{externe}}$ définis par

$$|\psi_{\pm}\rangle = \sum_n c_{n,\pm} |\psi_n\rangle. \quad (8.68)$$

Compte tenu de l'éq. 8.67, le carré de la norme de l'état $|\Psi\rangle$ s'écrit

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = (\langle\psi_+| \otimes {}_z\langle+| + \langle\psi_-| \otimes {}_z\langle-|) (|\psi_+\rangle \otimes |+\rangle_z + |\psi_-\rangle \otimes |-\rangle_z) = \langle\psi_+|\psi_+\rangle + \langle\psi_-|\psi_-\rangle, \quad (8.69)$$

ce qu'on peut interpréter comme une manifestation du théorème de Pythagore, les kets $|\psi_+\rangle \otimes |+\rangle_z$ et $|\psi_-\rangle \otimes |-\rangle_z$ étant évidemment orthogonaux. Sachant que $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$, les kets $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$ ne sont donc pas normés individuellement mais obéissent à la relation $\langle\psi_+|\psi_+\rangle + \langle\psi_-|\psi_-\rangle = 1$. Afin d'interpréter la signification physique des deux termes de cette somme, considérons une mesure de la grandeur S_z correspondant à la projection du spin selon l'axe z . Le sous-espace propre associé à la valeur propre $\pm\hbar/2$ est constitué de l'ensemble des kets de la forme $|\psi\rangle \otimes |\pm\rangle_z$, où $|\psi\rangle$ est un ket quelconque appartenant à $\mathcal{E}_{\text{externe}}$. Il s'agit d'un espace de dimension infinie, aussi sommes-nous dans le cas de valeurs propres dégénérées. L'application du postulat de la mesure repose alors sur l'utilisation des projecteurs

$$\hat{P}_{\pm} = \hat{I}_{\text{externe}} \otimes |\pm\rangle_z {}_z\langle\pm|. \quad (8.70)$$

En utilisant l'éq. 8.67, on obtient

$$\hat{P}_{\pm} |\Psi\rangle = \hat{P}_{\pm} (|\psi_+\rangle \otimes |+\rangle_z + |\psi_-\rangle \otimes |-\rangle_z) = |\psi_{\pm}\rangle \otimes |\pm\rangle_z. \quad (8.71)$$

On en déduit que la probabilité d'obtenir le résultat $\pm\hbar/2$ s'écrit

$$\mathcal{P}_{\pm} = \left\| \hat{P}_{\pm} |\Psi\rangle \right\|^2 = \langle\psi_{\pm}|\psi_{\pm}\rangle. \quad (8.72)$$

Si on obtient le résultat $\pm\hbar/2$, l'état du système juste après la mesure s'écrit alors $|\psi_{\pm}\rangle \otimes |\pm\rangle_z / \| |\psi_{\pm}\rangle \|$. En résumé, on retiendra que l'état d'une particule de spin 1/2 peut s'écrire comme la superposition linéaire $|\Psi\rangle = |\psi_+\rangle \otimes |+\rangle_z + |\psi_-\rangle \otimes |-\rangle_z$, faisant intervenir deux fonctions d'ondes $\psi_{\pm}(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\psi_{\pm}\rangle$ non normalisées associées respectivement aux états de spin $|+\rangle_z$ et $|-\rangle_z$. Les grandeurs $\langle\psi_+|\psi_+\rangle$ et

$\langle \psi_- | \psi_- \rangle$ représentent les probabilités respectives de mesurer $+\hbar/2$ ou $-\hbar/2$ pour la composante du spin selon l'axe z . Dans le cas d'un état factorisé $|\Psi\rangle = |\psi\rangle \otimes (a_+ |+\rangle_z + a_- |-\rangle_z)$, une seule fonction d'onde suffira à décrire l'état spatial de la particule, mais dans le cas d'une intrication entre position et spin, on aura besoin des deux fonctions d'onde $\psi_+(\vec{r})$ et $\psi_-(\vec{r})$ qui seront alors différentes.

Munis de cette description complète de l'état du système, nous pouvons revenir sur l'interprétation de l'expérience de Stern et Gerlach. Considérons le schéma expérimental représenté Fig. 8.8, légèrement modifié par rapport à l'expérience historique. L'approche proposée consiste à utiliser un faisceau laser à la place de l'écran, permettant de déterminer approximativement la position de l'atome en aval de l'appareil de Stern et Gerlach en observant la lumière diffusée par l'atome.

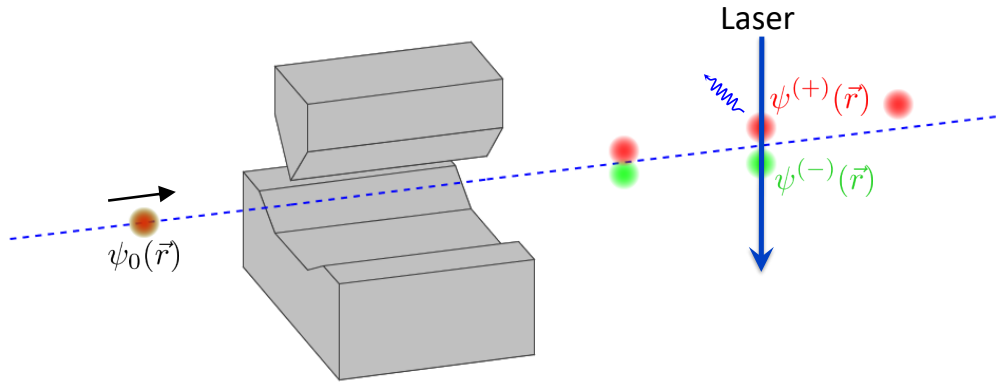


FIGURE 8.8 – *Mesure non destructive du spin d'un atome d'argent. Les fonctions d'onde $\psi_+(\vec{r})$ et $\psi_-(\vec{r})$ sont représentées respectivement en rouge et en vert. Un faisceau laser permet de visualiser la position approximative de l'atome en aval d'un appareil de Stern et Gerlach, réalisant une mesure quantique non destructive de l'état de spin du système.*

Supposons que l'atome soit à l'instant initial t_0 dans l'état $|\psi_0\rangle \otimes |+\rangle_z$, où $\psi_0(\vec{r})$ est le paquet d'ondes représenté Fig. 8.8 se dirigeant vers l'appareil de Stern et Gerlach. Sachant que le spin est dans l'état $|+\rangle_z$, on peut s'attendre d'après 8.2 à ce que le centre du paquet d'ondes soit dévié vers le haut, de sorte que le système sera à l'instant t_1 dans l'état $|\psi^{(+)}\rangle \otimes |+\rangle_z$, avec $\psi^{(+)}(\vec{r})$ le paquet d'ondes représenté en rouge sur la Fig. 8.8. À l'inverse, si l'atome est à l'instant initial dans l'état $|\psi_0\rangle \otimes |-\rangle_z$, on peut s'attendre à ce que le centre du paquet d'ondes soit dévié vers le bas, de sorte que le système sera à l'instant t_1 dans l'état $|\psi^{(-)}\rangle \otimes |-\rangle_z$, avec $\psi^{(-)}(\vec{r})$ le paquet d'ondes représenté en vert sur la Fig. 8.8. Enfin, si l'atome est à l'instant initial dans la superposition

$$|\Psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle \otimes (a_+ |+\rangle_z + a_- |-\rangle_z), \quad (8.73)$$

avec $|a_+|^2 + |a_-|^2 = 1$, alors on s'attend d'après le principe de superposition linéaire à ce que l'état du système à l'instant t_1 s'écrive

$$|\Psi(t_1)\rangle = a_+ |\psi^{(+)}\rangle \otimes |+\rangle_z + a_- |\psi^{(-)}\rangle \otimes |-\rangle_z. \quad (8.74)$$

On retrouve la forme générale d'un état de notre atome en accord avec l'éq. 8.67, avec $|\psi_{\pm}\rangle = a_{\pm} |\psi^{(\pm)}\rangle$. Alors que l'état initial $|\Psi(t_0)\rangle$ était un état factorisé, on voit que l'état $|\Psi(t_1)\rangle$ est maintenant un état intriqué, car les fonctions d'onde $\psi^{(+)}(\vec{r})$ et $\psi^{(-)}(\vec{r})$ sont clairement différentes. L'appareil de Stern et Gerlach est ainsi une machine à intriquer position et spin : on a maintenant

une corrélation entre l'état externe et l'état interne de l'atome. C'est cette corrélation qui permet de mesurer l'état de spin à l'aide d'une simple mesure de position. Pour effectuer cette dernière mesure de manière non destructive, on utilise ici un laser à la place d'un atome. On suppose qu'on dispose d'un système d'imagerie dont la résolution permet de savoir sur laquelle des deux trajectoires possible se trouve l'atome. Ainsi, on observera avec une probabilité $|a_+|^2$ que l'émission provient de la partie haute du dispositif, le système étant projeté après la mesure dans l'état $|\psi^{(+)}\rangle \otimes |+\rangle_z$. A l'inverse, on observera avec une probabilité $|a_-|^2$ que l'émission provient de la partie basse du dispositif, le système étant projeté après la mesure dans l'état $|\psi^{(-)}\rangle \otimes |-\rangle_z$. Le dispositif représenté Fig. 8.8 constitue ainsi un exemple de mesure quantique idéale au sens du postulat de la mesure introduit en 3.3.

Chapitre 9

Résonance magnétique nucléaire

Le chapitre 8 portait sur la notion de spin $1/2$, que nous avons discutée en nous appuyant sur l'expérience de Stern et Gerlach. On avait alors considéré que le spin électronique était seul responsable du moment magnétique des atomes d'argent ou d'hydrogène considérés dans l'expérience. Cette approximation est justifiée par le fait que le rapport gyromagnétique est inversement proportionnel à la masse, ce qui signifie que le moment magnétique nucléaire sera environ 3 ordres de grandeur plus petit que celui de l'électron. Néanmoins, cela ne signifie pas que le proton et le neutron – qui sont en fait aussi des particules de spin $1/2$ – ne portent pas de spin, mais que leurs moments magnétiques seront beaucoup plus faibles et donc beaucoup plus difficiles à mesurer. C'est pour relever ce défi expérimental que Rabi a été amené à inventer la Résonance Magnétique Nucléaire (RMN), méthode résonnante extrêmement sensible et qui fait l'objet de ce chapitre.

On donne ci-dessous les valeurs expérimentales des rapports gyromagnétiques du proton

$$\gamma_p \approx 5.59 \frac{q_p}{2m_p} \quad (9.1)$$

et du neutron

$$\gamma_n \approx -3.83 \frac{q_p}{2m_n}, \quad (9.2)$$

où q_p est la charge du proton, tandis que m_p et m_n sont les masses respectives du proton et du neutron. Dans la suite, on considérera une particule de spin $1/2$ et de rapport gyromagnétique γ , qui pourra être par exemple le proton, le neutron ou l'électron. Toutefois, nous considérerons plus spécifiquement le cas du proton quand il s'agira de donner des ordres de grandeur.

9.1 Quelques compléments sur le spin $1/2$

9.1.1 Sphère de Bloch

Avant de rentrer dans le détail de l'expérience de RMN, introduisons la notion de sphère de Bloch, qui permet de représenter l'état de spin d'une particule de spin $1/2$ de manière plus intuitive. Même si cette approche peut être également employée pour représenter l'état de n'importe quel système à deux états, on utilisera ici les notations se rapportant à une particule de spin $1/2$. On utilise la base propre de l'observable $\hat{S}_z$, qui sera simplement notée $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ dans ce chapitre. La forme générale

d'un état arbitraire de l'espace de Hilbert pourra donc s'écrire

$$|\psi\rangle = a_+|+\rangle + a_-|-\rangle, \quad (9.3)$$

où a_+ et a_- sont deux nombres complexes. Comme pour l'état de polarisation d'un photon discuté en 2.3.3, il est en fait possible de décrire l'état du système à l'aide de seulement deux nombres réels. Pour des raisons qui apparaîtront plus loin, nous allons définir ces deux nombres de manière légèrement différentes par rapport au cas de la polarisation d'un photon. Écrivons ici $a_+ = e^{i\phi_+} \cos \theta/2$ et $a_- = e^{i\phi_-} \sin \theta/2$, avec $\theta \in [0, \pi]$, ce qui permet d'assurer automatiquement la condition de normalisation $|a_+|^2 + |a_-|^2 = 1$. Posons alors $\phi_{\pm} = \phi \mp \varphi$, où $\phi = (\phi_+ + \phi_-)/2$. Remarquons que $\varphi = \phi_- - \phi_+$ correspond à la phase du nombre complexe $a_+^* a_-$, et couvre donc l'ensemble de l'intervalle $]-\pi, +\pi]$ (ou encore $[0, 2\pi[$). Avec ces notations, l'état du système devient

$$|\psi\rangle = e^{i\phi} \left(e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \right). \quad (9.4)$$

Enfin, sachant que la phase globale ϕ n'a pas de pertinence physique et peut donc être choisie égale à zéro, on peut décider d'écrire l'état du système sous la forme

$$|\psi\rangle = e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle, \quad (9.5)$$

avec $\theta \in [0, \pi]$ et $\varphi \in]-\pi, +\pi]$. Ce résultat correspond exactement à l'expression que nous avons obtenue au chapitre 8 pour l'état $|+\rangle_{\vec{u}}$ (eq. 8.50). A tout vecteur d'état $|\psi\rangle$, on peut donc faire correspondre un vecteur unitaire unique $\vec{u}$ tel que $|\psi\rangle$ soit vecteur propre de l'observable $\vec{S} \cdot \vec{u}$ pour la valeur propre $+\hbar/2$.

Nous avons donc réussi à identifier les deux paramètres réels recherchés pour caractériser l'état du système, et même à leur donner un sens physique très clair. Il s'agit de la colatitude θ et de l'angle azimutal (ou longitude) φ du vecteur unitaire $\vec{u}$ associé à l'état $|+\rangle_{\vec{u}}$ du système. L'état du système peut donc être défini par la position d'un point sur une sphère, appelée sphère de Bloch, comme représenté Fig. 9.1. Le vecteur $\vec{u}$ est quant à lui appelé vecteur de Bloch. On peut voir cette sphère soit comme une sphère de rayon unité, où est représenté le vecteur $\vec{u}$, soit comme une sphère de rayon $\hbar/2$, le vecteur représenté sur la sphère correspondant alors à la valeur moyenne du spin dans l'état considéré, $\langle \vec{S} \rangle = (\langle S_x \rangle, \langle S_y \rangle, \langle S_z \rangle)$. Cette situation où l'état du système est entièrement défini par la donnée des valeurs moyennes de seulement trois grandeurs physiques associées aux trois coordonnées cartésiennes est tout à fait remarquable, et est limitée au cas particulier d'un espace de Hilbert de dimension deux.

Un vecteur aligné selon l'axe z vers le pôle nord de la sphère de Bloch correspond ainsi à l'état $|+\rangle_z = |+\rangle$, tandis qu'un vecteur aligné vers le pôle sud correspond à l'état $|-\rangle_z = |-\rangle$. Il faudra ainsi prendre garde au fait que deux vecteurs orthogonaux dans l'espace de Hilbert ont des représentations opposées sur la sphère de Bloch. Un vecteur aligné selon l'axe x dans le sens des x positifs correspond à l'état $|+\rangle_x$. De même, un vecteur aligné selon l'axe y correspond à l'état $|+\rangle_y$,

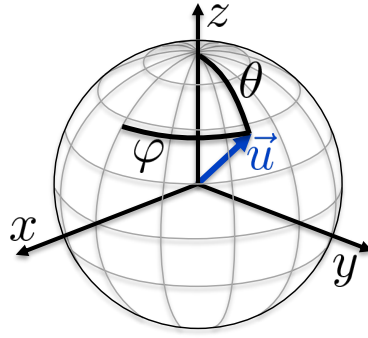


FIGURE 9.1 – Représentation sur la sphère de Bloch de l'état $|+\rangle_{\vec{u}}$ du système, à l'aide du vecteur unitaire $\vec{u}$ de coordonnées sphériques θ et φ .

avec toutefois un facteur de phase global puisque pour $\theta = \varphi = \pi/2$, on a

$$|+\rangle_{\pi/2, \pi/2} = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}} |-\rangle = e^{-i\pi/4} \frac{|+\rangle + i|-\rangle}{\sqrt{2}} = e^{-i\pi/4} |+\rangle_y \quad (9.6)$$

ce qui nous fait donc un déphasage (sans importance) de $\pi/4$ par rapport à la définition habituelle de l'état $|+\rangle_y$ donnée par l'éq. 8.31.

La sphère de Bloch peut être utilisée pour représenter tout système à deux états, même si ce n'est que dans le cas du spin 1/2 que le vecteur de Bloch représente directement une quantité physique concrète, pointant dans la direction du spin moyen $\langle \vec{S} \rangle$. On peut par exemple utiliser la sphère de Bloch pour décrire l'état de polarisation d'un photon, en remplaçant les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ par les états de polarisation circulaire gauche et droite du photon. On obtient alors la *sphère de Poincaré*, également utile en optique classique pour représenter l'état de polarisation de la lumière. Les états de polarisation linéaire sont alors localisés dans le plan équatorial de la sphère de Poincaré.

9.1.2 Rotation d'un spin 1/2

Considérons une rotation d'angle α autour de l'axe z et cherchons à évaluer l'opérateur $\hat{R}_\alpha$ représentant l'effet de cette rotation dans l'espace de Hilbert. Il est clair que lors d'une telle rotation, on s'attend à ce que le vecteur $\langle \vec{S} \rangle$ tourne lui aussi d'un angle α autour de l'axe z . Comme $\langle \vec{S} \rangle = (\hbar/2)\vec{u}$, cela signifie qu'il en va de même pour le vecteur de Bloch $\vec{u}$. En d'autres termes, la colatitude θ est inchangée tandis que la longitude subit la transformation $\varphi \mapsto \varphi + \alpha$. Pour un état initial $|\psi\rangle$ défini selon l'éq. 9.5, l'état tourné s'écrit alors

$$\hat{R}_\alpha |\psi\rangle = e^{-i(\varphi+\alpha)/2} \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + e^{i(\varphi+\alpha)/2} \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \quad (9.7)$$

$$= e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\alpha/2} |+\rangle + e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\alpha/2} |-\rangle \quad (9.8)$$

ce qui nous permet d'en déduire l'action de l'opérateur $\hat{R}_\alpha$ sur les vecteurs de base

$$\hat{R}_\alpha |\pm\rangle = e^{\mp i\alpha/2} |\pm\rangle \quad (9.9)$$

ou encore, sous forme matricielle,

$$\hat{R}_\alpha = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}. \quad (9.10)$$

Il s'agit d'une exponentielle d'opérateur, que l'on peut écrire

$$\hat{R}_\alpha = \exp \left(-i \frac{\alpha \hat{S}_z}{\hbar} \right). \quad (9.11)$$

L'opérateur rotation s'exprime donc à l'aide de la projection $\hat{S}_z$ du spin selon l'axe de rotation choisi. De manière générale, pour une rotation caractérisée par le vecteur $\vec{\alpha}$, l'axe de la rotation étant défini par la direction du vecteur α tandis que l'angle est égal à $\alpha = \|\vec{\alpha}\|$, on peut écrire

$$\hat{R}_{\vec{\alpha}} = \exp \left(-i \frac{\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{S}}}{\hbar} \right). \quad (9.12)$$

On peut montrer qu'il s'agit là de l'expression générale de l'opérateur rotation en fonction de l'opérateur moment cinétique du système, qu'il s'agisse du moment cinétique intrinsèque comme ici pour le spin, ou plus généralement du moment cinétique total du système [10].

9.1.3 Précession de Larmor

Plaçons notre particule dans un champ magnétique $\vec{B}_0$ orienté selon l'axe z . L'Hamiltonien du système s'écrit alors

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0 = -\gamma B_0 \hat{S}_z, \quad (9.13)$$

où nous avons écrit le moment magnétique selon l'expression $\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$, γ étant le rapport gyromagnétique de la particule. En posant $\omega_0 = -\gamma B_0$, on obtient simplement

$$\hat{H} = \omega_0 \hat{S}_z \quad (9.14)$$

ou encore, sous forme matricielle

$$\hat{H} = \frac{\hbar \omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (9.15)$$

Comme représenté Fig. 9.2, le champ magnétique a donc pour effet de cliver notre système à deux états qui était initialement dégénéré. Dans le cas d'une particule de rapport gyromagnétique positif comme le proton, ω_0 est négatif et l'état $|+\rangle$ sera le niveau fondamental. A l'inverse, pour une particule de rapport gyromagnétique négatif comme l'électron ou le neutron, c'est l'état $|-\rangle$ qui sera l'état fondamental.

Considérons un état initial arbitraire que nous exprimons dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ à l'aide de la colatitude θ et de la longitude φ ,

$$|\psi(0)\rangle = e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle. \quad (9.16)$$

La base utilisée étant la base propre de l'Hamiltonien, on peut écrire directement l'état $|\psi(t)\rangle$ à

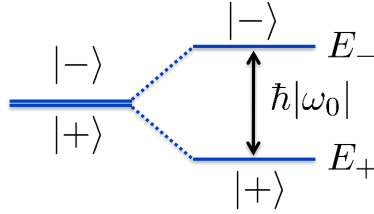


FIGURE 9.2 – Clivage d'un système de spin 1/2 sous l'action d'un champ magnétique B_0 dans le cas d'une particule de rapport gyromagnétique négatif. Les deux niveaux d'énergie sont $E_{\pm} = \pm \hbar \omega_0 / 2$.

tout instant selon l'expression

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\omega_0 t/2} |+\rangle + e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\omega_0 t/2} |-\rangle. \quad (9.17)$$

On reconnaît ici l'action donnée par l'éq. 9.8 de l'opérateur rotation $\hat{R}_\alpha$ sur les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$, avec $\alpha = \omega_0 t$. On en déduit

$$|\psi(t)\rangle = \hat{R}_{\omega_0 t} |\psi(0)\rangle. \quad (9.18)$$

Une autre manière d'aboutir à ce même résultat consiste à utiliser l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t)$ introduit en 3.4. Selon l'éq. 3.79, on peut en effet écrire

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} = e^{-i\omega_0 t \hat{S}_z/\hbar} = \hat{R}_{\omega_0 t}, \quad (9.19)$$

ce qui permet de retrouver l'état $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle$ donné par l'éq. 9.18. Le vecteur de Bloch représentant l'état du système va donc tourner autour de l'axe z à la fréquence ω_0 , de même que la valeur moyenne du spin $\langle \vec{S} \rangle = \langle \psi(t) | \vec{S} | \psi(t) \rangle$. C'est le phénomène de précession de Larmor, dont le traitement classique a été effectué en 8.1.3. Remarquons que l'on retrouve le même sens de rotation que pour la précession de Larmor classique (en accord avec l'expérience), ce qui confirme que nous avons choisi la bonne valeur de ϕ_y lors de la construction de $\hat{S}_y$ en 8.3.

On peut aisément retrouver ce résultat à l'aide du théorème d'Ehrenfest que nous avons établi en 3.5.4. Pour appliquer ce théorème à l'évolution temporelle du spin, il suffit d'écrire les commutateurs entre les composantes cartésienne du spin et l'Hamiltonien $\hat{H} = \omega_0 \hat{S}_z$, ce qui nous donne les expressions

$$[\hat{S}_x, \hat{H}] = \omega_0 [\hat{S}_x, \hat{S}_z] = -i\hbar \omega_0 \hat{S}_y \quad (9.20)$$

$$[\hat{S}_y, \hat{H}] = \omega_0 [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \omega_0 \hat{S}_x \quad (9.21)$$

$$[\hat{S}_z, \hat{H}] = \omega_0 [\hat{S}_z, \hat{S}_z] = 0 \quad (9.22)$$

En remplaçant dans l'éq. 3.121, on obtient

$$\frac{d\langle S_x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{S}_x, \hat{H}] | \psi(t) \rangle = -\omega_0 \langle S_y \rangle \quad (9.23)$$

$$\frac{d\langle S_y \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{S}_y, \hat{H}] | \psi(t) \rangle = \omega_0 \langle S_x \rangle \quad (9.24)$$

$$\frac{d\langle S_z \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{S}_z, \hat{H}] | \psi(t) \rangle = 0 \quad (9.25)$$

où nous reconnaissons l'expression du produit vectoriel, soit

$$\frac{d\langle\vec{S}\rangle}{dt} = -\gamma\vec{B}_0 \times \langle\vec{S}\rangle = \gamma\langle\vec{S}\rangle \times \vec{B}_0. \quad (9.26)$$

On retrouve exactement la même expression que l'éq. 8.10 obtenue pour le traitement classique de la précession de Larmor. On obtient donc pour la valeur moyenne $\langle\vec{S}\rangle$ une évolution similaire à la précession de Larmor classique, à savoir une précession autour du champ magnétique appliqué.

On pourra se familiariser à la fois avec la sphère de Bloch et avec la précession de Larmor à l'aide de la simulation www.quantum-physics.polytechnique.fr/larmor.php.

9.2 Résonance magnétique nucléaire

9.2.1 Dispositif expérimental

On considère une assemblée de particules de spin 1/2 dont chacune est placée dans l'état initial $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$, ce qui correspond au point situé au pôle nord de la sphère de Bloch, avec $\langle S_z \rangle = \hbar/2$ et $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$. On place ces particules au centre du dispositif expérimental représenté Fig. 9.3, qui permet d'appliquer un champ magnétique $\vec{B}(t)$ résultant de la superposition d'un champ magnétique statique $\vec{B}_0$ orienté selon l'axe z et d'un champ magnétique $\vec{B}_1(t)$ tournant dans le plan xy à la fréquence ω , que l'on choisira proche de la fréquence de Larmor $\omega_0 = -\gamma B_0$.

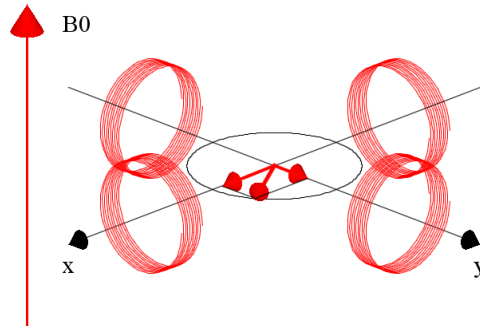


FIGURE 9.3 – Dispositif expérimental permettant d'observer le phénomène de résonance magnétique nucléaire. Le courant électrique sinusoïdal circulant dans les bobines de Helmholtz orienté selon l'axe y est en quadrature par rapport à celui circulant dans les bobines orientées selon l'axe x , afin de produire un champ magnétique tournant dans le plan xy .

Le champ magnétique appliqué au système s'écrit donc

$$\vec{B}(t) = \vec{B}_0 + \vec{B}_1(t) = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ B_0 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} B_1 \cos \omega t \\ B_1 \sin \omega t \\ 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} B_1 \cos \omega t \\ B_1 \sin \omega t \\ B_0 \end{vmatrix}, \quad (9.27)$$

où B_1 représente l'amplitude du champ tournant. Le champ magnétique total $\vec{B}(t)$ effectue ainsi un mouvement de précession autour de l'axe z à la fréquence ω . On pose $\omega_1 = -\gamma B_1$, grandeur homogène à une fréquence et proportionnelle à B_1 . En pratique, le champ tournant sera très faible devant le champ statique, soit $B_1 \ll B_0$, ou encore $|\omega_1| \ll |\omega_0|$. L'Hamiltonien du problème s'écrit

alors

$$\hat{H}(t) = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}(t). \quad (9.28)$$

Cet Hamiltonien a exactement la même forme que celle donnée par l'éq. 9.13, à la nuance près que le champ magnétique est maintenant une fonction du temps. L'Hamiltonien n'étant plus indépendant du temps, il ne sera pas possible d'avoir recours à la méthode habituelle consistant à écrire l'état solution de l'équation de Schrödinger comme une superposition d'états stationnaires. Nous allons maintenant discuter différentes méthodes permettant d'aborder ce problème dépendant du temps.

9.2.2 Précession de Larmor autour d'un champ dépendant du temps

La première méthode consiste à remarquer que le théorème d'Ehrenfest établi en 3.5.4 reste valable même lorsque l'Hamiltonien dépend du temps. Nous pouvons donc directement remplacer dans l'éq. 9.26 le champ statique $\vec{B}_0$ par le champ dépendant du temps $\vec{B}(t)$, ce qui nous donne

$$\frac{d\langle\vec{S}\rangle}{dt} = -\gamma\vec{B}(t) \times \langle\vec{S}\rangle. \quad (9.29)$$

On peut en conclure que le vecteur de Bloch va effectuer un mouvement de précession, mais cette fois-ci autour d'un champ qui précesse lui-même autour de l'axe z . On pourra se faire une idée du mouvement assez complexe qui en résulte à l'aide de www.quantum-physics.polytechnique.fr/nmr.php. La Fig. 9.4(a) représente l'évolution de $\langle\vec{S}\rangle$ lorsqu'on se place à résonance, c'est-à-dire lorsque la fréquence de rotation du champ tournant ω est exactement égale à la fréquence de Larmor ω_0 . Le champ $\vec{B}_1(t)$ reste alors toujours orthogonal au vecteur $\langle\vec{S}\rangle$, de sorte que la précession du spin autour de $\vec{B}_1(t)$ se fait toujours dans le même sens. Ceci permet au spin de passer progressivement du pôle nord au pôle sud de la sphère de Bloch, comme le montre la trajectoire (en rouge) décrite par

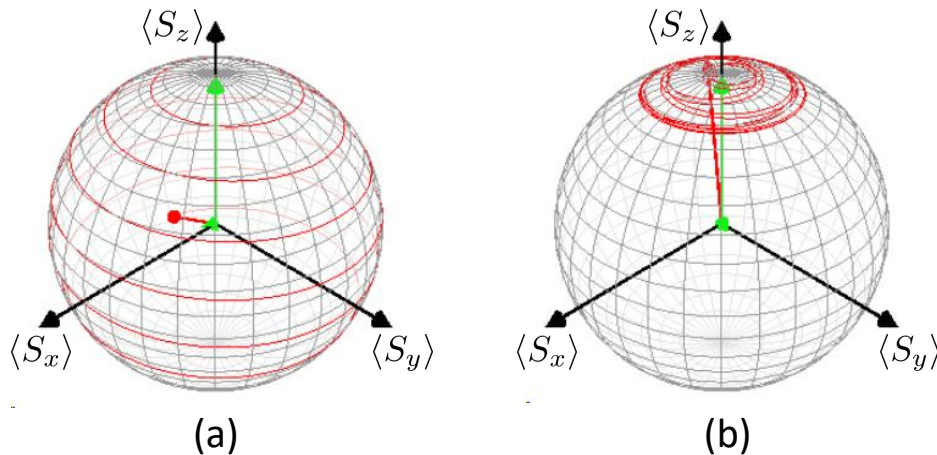


FIGURE 9.4 – Simulation de l'évolution du vecteur de Bloch lors d'une expérience de RMN, (a) dans le cas résonnant avec $\omega = \omega_0$, et (b) non-résonnant avec $\omega = 1.2\omega_0$. Extrait de www.quantum-physics.polytechnique.fr/nmr.php.

la pointe du vecteur $\langle\vec{S}\rangle$ sur la sphère de Bloch. La longitude augmente continuellement sous l'effet de la précession de Larmor à la fréquence ω_0 , tandis que la colatitude passe de 0 à π sous l'effet de la précession plus lente autour du champ tournant. Après avoir atteint le pôle sud, le mouvement de double précession se poursuit dans le même sens pour ramener le spin vers le pôle nord. La fréquence

du mouvement de précession autour du champ tournant est $\omega_1 = -\gamma B_1$, supposée très inférieure à ω_0 . Considérons maintenant le cas où la condition de résonance n'est pas remplie, soit $\omega \neq \omega_0$. Le déphasage qui s'accumule alors entre le champ tournant et le spin a pour conséquence que le sens dans lequel s'effectue la précession autour de $\vec{B}_1(t)$ s'inverse régulièrement, avec pour résultat une amplitude de variation beaucoup plus faible pour le spin, comme représenté Fig. 9.4(b).

Cette première approche qualitative capture déjà l'essentiel de la physique du phénomène de résonance magnétique nucléaire. Pour aller plus loin, plaçons-nous dans un référentiel tournant autour de l'axe z à la fréquence ω , dans lequel le champ tournant devient fixe. Ainsi, la composante du champ effectif dans le plan xy restera en permanence alignée avec l'axe x . De plus, la précession de Larmor due au champ $\vec{B}_0$ se fera à une fréquence diminuée de ω , soit $\omega_0 - \omega$, car nous sommes dans un référentiel tournant à ω . Tout se passe comme si l'amplitude du champ le long de l'axe z était remplacée par $B'_0 = B_0 + \omega/\gamma$, donnant ainsi lieu à une fréquence de Larmor dans le référentiel tournant égale à $-\gamma B'_0 = \omega_0 - \omega$. On en déduit que le champ effectif à prendre en compte dans le référentiel tournant s'écrit

$$\vec{B}_{\text{eff}} = \begin{vmatrix} B_1 \\ 0 \\ B_0 + \omega/\gamma \end{vmatrix} = -\frac{1}{\gamma} \begin{vmatrix} \omega_1 \\ 0 \\ \omega_0 - \omega \end{vmatrix} \quad (9.30)$$

Dans le référentiel tournant, le problème se ramène donc à une simple précession de Larmor autour du champ constant $\vec{B}_{\text{eff}}$. La fréquence associée à cette précession est appelée *fréquence de Rabi* et s'écrit

$$\Omega = |\gamma| B_{\text{eff}} = \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2}. \quad (9.31)$$

Appelons α l'angle entre le champ effectif et l'axe z , dont le sinus est le rapport entre B_1 et B_{eff} , soit

$$\sin \alpha = \frac{B_1}{B_{\text{eff}}} = \frac{|\omega_1|}{\Omega}. \quad (9.32)$$

La Fig. 9.5(a) représente la projection du mouvement de précession dans le plan xz . Comme dans toute précession de Larmor, la projection du spin dans la direction du champ appliqué se conserve. La longueur de ce vecteur étant $(\hbar/2) \cos \alpha$, ses coordonnées s'écrivent $(\sin \alpha, 0, \cos \alpha)(\hbar/2) \cos \alpha$,

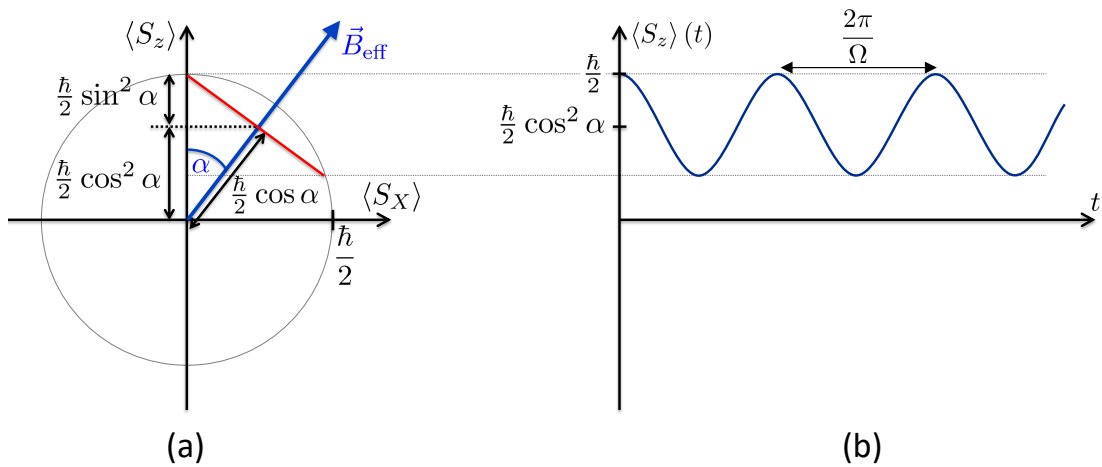


FIGURE 9.5 – (a) Vue de côté de la précession de Larmor représentée dans le référentiel tournant dans les conditions d'une expérience de RMN, avec $\omega \neq \omega_0$. (b) Evolution temporelle de $\langle S_z \rangle(t)$.

ce qui correspond au centre du cercle décrit par le spin sur la sphère de Bloch. La projection de ce mouvement circulaire sur l'axe z donnera donc lieu à une évolution sinusoïdale de fréquence Ω autour du point d'ordonnée $(\hbar/2) \cos^2 \alpha$, comme représenté Fig. 9.5(b). Sachant que la valeur initiale est $\langle S_z \rangle(0) = \hbar/2$, on en déduit que l'amplitude de l'oscillation s'écrit $\hbar/2 - (\hbar/2) \cos^2 \alpha = (\hbar/2) \sin^2 \alpha$. On obtient donc

$$\langle S_z \rangle(t) = \frac{\hbar}{2} \cos^2 \alpha + \frac{\hbar}{2} \sin^2 \alpha \cos \Omega t, \quad (9.33)$$

qui satisfait bien la condition initiale $\langle S_z \rangle(0) = \hbar/2$. Appelons $\mathcal{P}_{\pm}(t)$ la probabilité de mesurer la valeur $S_z = \pm \hbar/2$ à l'instant t . On peut alors écrire

$$\langle S_z \rangle(t) = \frac{\hbar}{2} \mathcal{P}_+(t) - \frac{\hbar}{2} \mathcal{P}_-(t) = \frac{\hbar}{2} - \hbar \mathcal{P}_-(t), \quad (9.34)$$

où on a utilisé $\mathcal{P}_+(t) + \mathcal{P}_-(t) = 1$. On en déduit que la probabilité que le spin ait basculé dans l'état $|-\rangle$ à l'instant t s'écrit

$$\mathcal{P}_-(t) = \frac{1}{2} - \frac{\langle S_z \rangle(t)}{\hbar} = \frac{1 - \cos^2 \alpha}{2} - \frac{\sin^2 \alpha}{2} \cos \Omega t = \frac{\sin^2 \alpha}{2} (1 - \cos \Omega t). \quad (9.35)$$

En exprimant $\sin^2 \alpha$ à l'aide de l'éq. 9.32, on en déduit

$$\mathcal{P}_-(t) = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \frac{1 - \cos \Omega t}{2} = \frac{\omega_1^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2} \frac{1 - \cos \Omega t}{2}. \quad (9.36)$$

Les oscillations sinusoïdales de fréquence Ω ainsi obtenues, représentées Fig. 9.6, sont appelées les *oscillations de Rabi*. On observe un retournement total du spin dans le cas résonnant, avec une fréquence d'oscillation égale à ω_1 , encore appelée fréquence de Rabi résonnante. Ce résultat est en accord avec l'éq. 9.31 dans le cas où $\omega = \omega_0$. Par contre, lorsque $\omega \neq \omega_0$, la fréquence de Rabi Ω est plus grande, donnant lieu aux oscillations plus rapides observées dans ce cas sur la figure. Bien que les deux courbes soient similaires dans les premiers instants, on peut remarquer que la probabilité atteint plus rapidement sa valeur maximale dans le cas non résonnant, ce que l'on peut attribuer physiquement au déphasage mentionné plus haut entre le spin et le champ tournant.

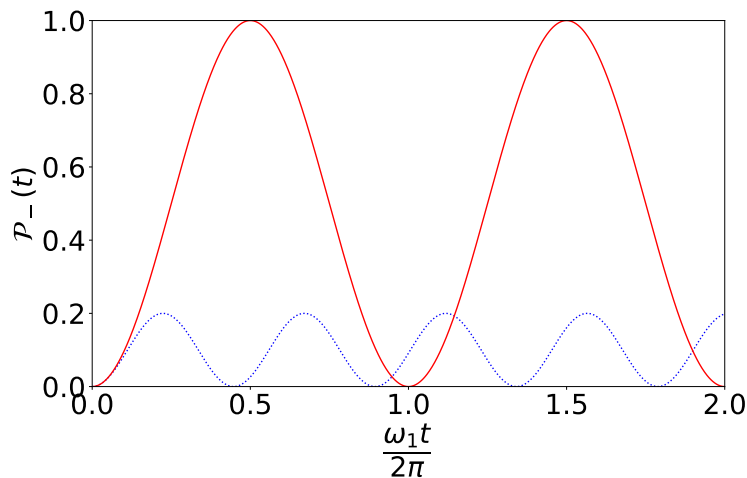


FIGURE 9.6 – Représentation des oscillations de Rabi dans le cas résonnant (traits pleins), i.e. $\omega = \omega_0$, et dans le cas non résonnant (pointillés), avec ici $\omega_0 - \omega = 2\omega_1$.

L'éq. 9.36 peut encore s'écrire

$$\mathcal{P}_-(t) = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega t}{2}, \quad (9.37)$$

ce qui permet de calculer facilement la probabilité moyennée sur le temps que le spin soit détecté dans l'état $|-\rangle$,

$$\overline{\mathcal{P}}_- = \frac{\omega_1^2}{2\Omega^2} = \frac{1}{2} \frac{\omega_1^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2}. \quad (9.38)$$

Il s'agit d'une courbe de résonance de forme Lorentzienne, représentée Fig. 9.7. La mi-hauteur est atteinte lorsque $|\omega_0 - \omega| = |\omega_1|$, ce qui signifie que la largeur à mi-hauteur est égale à $2|\omega_1|$. On en déduit que la résonance sera d'autant plus fine que l'amplitude $B_1 = |\omega_1/\gamma|$ du champ tournant sera faible.

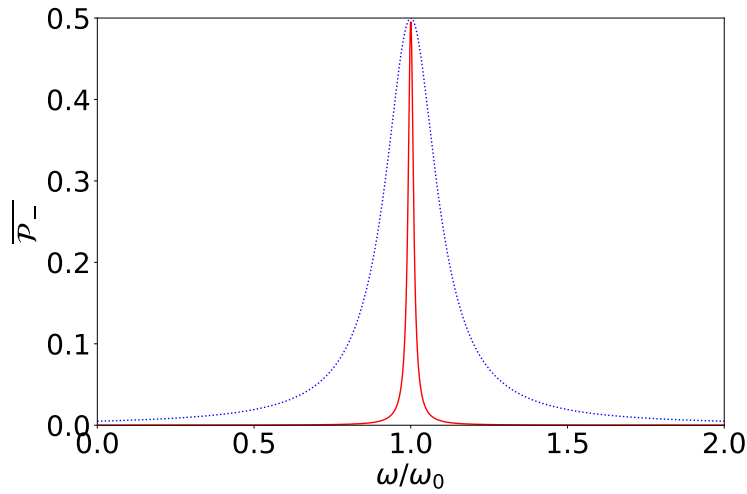


FIGURE 9.7 – Représentation de la courbe de résonance calculée à l'aide de l'éq. 9.38, dans le cas où $\omega_1 = \omega_0/10$ (pointillés) et où $\omega_1 = \omega_0/100$ (traits pleins). La largeur à mi-hauteur de la Lorentzienne est égale à $2|\omega_1|$.

9.2.3 Résolution directe de l'équation de Schrödinger

Une autre méthode pour traiter la RMN repose sur une résolution directe de l'équation de Schrödinger. Pour cela, écrivons l'Hamiltonien dépendant du temps

$$\hat{H}(t) = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}(t) = -\gamma \hat{\vec{S}} \cdot (\vec{B}_0 + \vec{B}_1(t)) = -\gamma B_0 \hat{S}_z - \gamma B_1 \hat{S}_x \cos \omega t - \gamma B_1 \hat{S}_y \sin \omega t, \quad (9.39)$$

soit

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar \omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar \omega_1}{2} \cos \omega t \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar \omega_1}{2} \sin \omega t \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (9.40)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}. \quad (9.41)$$

Ecrivons l'état du système sous la forme $|\psi(t)\rangle = a_+(t)|+\rangle + a_-(t)|-\rangle$. L'équation de Schrödinger s'écrit alors

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{a}_+ \\ \dot{a}_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} \quad (9.42)$$

soit

$$\dot{a}_{\pm} = -\frac{i}{2} (\pm\omega_0 a_{\pm}(t) + \omega_1 e^{\mp i\omega t} a_{\mp}(t)). \quad (9.43)$$

Afin de résoudre le système d'équations différentielles dépendant du temps ainsi obtenu, on se place comme plus haut dans un référentiel tournant à la fréquence ω . Ceci revient à introduire le ket $|\tilde{\psi}(t)\rangle = \hat{R}_{-\omega t}|\psi(t)\rangle$ où l'opérateur rotation $\hat{R}_{-\omega t}$ est obtenu en remplaçant l'angle α par $-\omega t$ dans l'éq. 9.10. En posant $|\tilde{\psi}(t)\rangle = b_+(t)|+\rangle + b_-(t)|-\rangle$, on obtient alors

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \begin{pmatrix} b_+(t) \\ b_-(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} a_+(t) \\ e^{-i\omega t/2} a_-(t) \end{pmatrix} \quad (9.44)$$

soit

$$b_{\pm}(t) = \exp(\pm i\omega t/2) a_{\pm}(t). \quad (9.45)$$

En dérivant par rapport au temps, on obtient

$$\dot{b}_{\pm}(t) = \frac{d}{dt} \exp(\pm i\omega t/2) a_{\pm}(t) \quad (9.46)$$

$$= \exp(\pm i\omega t/2) \left(\pm i \frac{\omega}{2} a_{\pm}(t) + \dot{a}_{\pm}(t) \right) \quad (9.47)$$

$$= \exp(\pm i\omega t/2) \left(\pm i \frac{\omega}{2} a_{\pm}(t) - \frac{i}{2} (\pm\omega_0 a_{\pm} + \omega_1 e^{\mp i\omega t} a_{\mp}) \right) \quad (9.48)$$

soit

$$\dot{b}_{\pm}(t) = \mp i \frac{\omega_0 - \omega}{2} b_{\pm}(t) - i \frac{\omega_1}{2} b_{\mp}(t) \quad (9.49)$$

On obtient donc le système d'équations linéaires

$$\begin{cases} \dot{b}_+(t) = -i \frac{\omega_0 - \omega}{2} b_+(t) - i \frac{\omega_1}{2} b_-(t) \\ \dot{b}_-(t) = -i \frac{\omega_1}{2} b_+(t) + i \frac{\omega_0 - \omega}{2} b_-(t) \end{cases} \quad (9.50)$$

que l'on peut écrire sous la forme

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{b}_+ \\ \dot{b}_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 \\ \omega_1 & -(\omega_0 - \omega) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix}, \quad (9.51)$$

ou encore

$$i\hbar \frac{d|\tilde{\psi}\rangle}{dt} = \hat{H}_{\text{eff}} |\tilde{\psi}(t)\rangle, \quad (9.52)$$

où on a introduit l'Hamiltonien effectif

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 \\ \omega_1 & -(\omega_0 - \omega) \end{pmatrix} = (\omega_0 - \omega) \hat{S}_z + \omega_1 \hat{S}_x. \quad (9.53)$$

On constate que la dépendance en temps du terme non diagonal a bien été éliminée dans l'Hamiltonien effectif, ce qui était précisément l'objectif poursuivi en se plaçant dans le référentiel tournant, dans lequel le champ magnétique tournant devient fixe. D'autre part, dans les éléments diagonaux de l'Hamiltonien, ω_0 est remplacé par $\omega_0 - \omega$. Comme déjà mentionné en 9.2.2, la précession de Larmor dans le référentiel tournant s'effectue à une fréquence $\omega_0 - \omega$, qui combinée à la rotation du référentiel à la fréquence ω nous redonnera bien une précession de Larmor à la fréquence ω_0

dans le référentiel fixe. On retrouve sans surprise le fait que l'Hamiltonien effectif n'est autre que l'Hamiltonien d'une particule de spin 1/2 placée dans le champ effectif donné par l'éq. 9.30.

A ce stade, on peut distinguer deux variantes pour achever la résolution du problème. La première consiste à diagonaliser l'Hamiltonien effectif, maintenant indépendant du temps, que l'on peut écrire $\hat{H}_{\text{eff}} = \Omega \hat{S} \cdot \vec{u}$, où $\vec{u}$ est un vecteur unitaire aligné avec le champ effectif. On peut alors utiliser l'expression des vecteurs propres $|\pm\rangle_{\vec{u}}$ de $\hat{H}_{\text{eff}}$ déjà établie en 8.4, puis décomposer l'état initial $|+\rangle$ dans cette base. On pourra alors écrire

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\Omega t/2} |+\rangle_{\vec{u}} \langle +|+\rangle + e^{i\Omega t/2} |-\rangle_{\vec{u}} \langle -|+\rangle, \quad (9.54)$$

puis redécomposer cet état dans la base initiale $\{|+\rangle, |-\rangle\}$. La seconde variante, que nous allons détailler ci-dessous, consiste à dériver à nouveau l'éq. 9.49 par rapport au temps, ce qui nous donne

$$\ddot{b}_{\pm}(t) = \mp i \frac{\omega_0 - \omega}{2} \dot{b}_{\pm}(t) - i \frac{\omega_1}{2} \dot{b}_{\mp}(t) \quad (9.55)$$

$$= \mp i \frac{\omega_0 - \omega}{2} \left(\mp i \frac{\omega_0 - \omega}{2} b_{\pm}(t) - i \frac{\omega_1}{2} b_{\mp}(t) \right) - i \frac{\omega_1}{2} \left(\pm i \frac{\omega_0 - \omega}{2} b_{\mp}(t) - i \frac{\omega_1}{2} b_{\pm}(t) \right) \quad (9.56)$$

$$= - \left(\left(\frac{\omega_0 - \omega}{2} \right)^2 + \left(\frac{\omega_1}{2} \right)^2 \right) b_{\pm}(t) \quad (9.57)$$

ou encore

$$\ddot{b}_{\pm}(t) + \left(\frac{\Omega}{2} \right)^2 b_{\pm}(t) = 0, \quad (9.58)$$

La solution générale de cette équation différentielle du second ordre s'écrit

$$b_{\pm}(t) = A \cos \frac{\Omega t}{2} + B \sin \frac{\Omega t}{2}, \quad (9.59)$$

les constantes A et B pouvant être déterminées à l'aide des conditions initiales $b_{\pm}(0)$ et $\dot{b}_{\pm}(0)$. Ainsi $b_{\pm}(0) = A$ et $\dot{b}_{\pm}(0) = \Omega B/2$, d'où

$$b_{\pm}(t) = b_{\pm}(0) \cos \frac{\Omega t}{2} + \frac{2}{\Omega} \dot{b}_{\pm}(0) \sin \frac{\Omega t}{2}. \quad (9.60)$$

Enfin, il faut se rappeler qu'on était parti d'un système d'équations du premier ordre, ce qui signifie que $\dot{b}_{\pm}(0)$ est en réalité fonction de $b_{\pm}(0)$. Selon l'éq. 9.49

$$\dot{b}_{\pm}(0) = \mp i \frac{\omega_0 - \omega}{2} b_{\pm}(0) - i \frac{\omega_1}{2} b_{\mp}(0), \quad (9.61)$$

ce qui nous permet finalement d'écrire

$$b_{\pm}(t) = b_{\pm}(0) \cos \frac{\Omega t}{2} + \left(\mp i \frac{\omega_0 - \omega}{\Omega} b_{\pm}(0) - i \frac{\omega_1}{\Omega} b_{\mp}(0) \right) \sin \frac{\Omega t}{2}. \quad (9.62)$$

En utilisant l'éq. 9.45 pour revenir dans le référentiel fixe, on en déduit finalement la solution générale de l'équation de Schrödinger dépendant du temps,

$$a_{\pm}(t) = e^{\mp i\omega t/2} \left(a_{\pm}(0) \cos \frac{\Omega t}{2} + \left(\mp i \frac{\omega_0 - \omega}{\Omega} a_{\pm}(0) - i \frac{\omega_1}{\Omega} a_{\mp}(0) \right) \sin \frac{\Omega t}{2} \right). \quad (9.63)$$

En utilisant la condition initiale $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$, soit $a_+(0) = 1$ et $a_-(0) = 0$, on obtient

$$a_+(t) = e^{-i\omega t/2} \left(\cos \frac{\Omega t}{2} - i \frac{\omega_0 - \omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \right) \quad (9.64)$$

$$a_-(t) = -ie^{i\omega t/2} \frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \quad (9.65)$$

La probabilité de mesurer le spin dans l'état $|-\rangle$ s'écrit alors

$$\mathcal{P}_-(t) = |\langle -|\psi(t)\rangle|^2 = |a_-(t)|^2 = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega t}{2} = \frac{1}{2} \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} (1 - \cos \Omega t), \quad (9.66)$$

ce qui nous redonne bien l'éq. 9.36 obtenue plus haut.

9.3 Applications

Les applications de la RMN sont innombrables, comme en témoignent les nombreux prix Nobel ayant jalonné son développement. Ainsi, le prix Nobel de physique 1944 fut décerné à Rabi pour la démonstration de cette nouvelle méthode à l'aide de jets moléculaires. Cette première expérience était relativement complexe, en raison des appareils de Stern et Gerlach nécessaires pour la préparation de l'état initial $|+\rangle$ et pour la mesure de l'état du système après l'interaction avec le champ tournant. Bloch et Purcell furent ensuite récompensés par le prix Nobel de physique 1952 pour avoir étendu la RMN à la matière condensée. L'idée est alors d'utiliser la très légère différence de population des deux états $|+\rangle$ et $|-\rangle$. En effet, selon la loi de Boltzmann le rapport entre les probabilités d'occupation de deux états d'énergies E_1 et E_2 s'écrit

$$\frac{\mathcal{P}_2}{\mathcal{P}_1} = \exp \left(-\frac{E_2 - E_1}{k_B T} \right), \quad (9.67)$$

pour un système à l'équilibre thermique à une température absolue T , avec k_B la constante de Boltzmann. Dans notre cas, en raison du clivage entre les deux niveaux d'énergie représentés Fig. 9.2, on obtient des rapports de population

$$\frac{\mathcal{P}_-}{\mathcal{P}_+} = \exp \left(-\frac{\hbar|\omega_0|}{k_B T} \right) \approx 1 - \frac{\hbar|\omega_0|}{k_B T} \approx 1 - 10^{-5}, \quad (9.68)$$

pour des protons placés à température ambiante dans un champ magnétique $B_0 = 1.4$ T. On peut alors décrire le système comme un mélange statistique presque équiprobable de protons dans l'état $|+\rangle$ et dans l'état $|-\rangle$. Les signaux produits par ces deux populations s'annulent presque exactement, mais la très légère prédominance des protons dans l'état $|+\rangle$ fait qu'il subsiste un signal mesurable, même s'il est atténué d'un facteur 10^5 . Suivirent le prix Nobel de chimie 1991, décerné à Ernst pour la RMN par transformée de Fourier et la RMN à deux dimensions, puis une part du prix Nobel de chimie 2002, décernée à Wüthrich pour l'application à la structure des protéines, et enfin le prix Nobel de physiologie et médecine 2003 décerné à Lauterbur et Mansfield pour l'Imagerie par Résonance Magnétique (IRM).

Plus généralement, la RMN n'est qu'un exemple de processus d'interaction entre un champ oscillant résonnant et un système à deux états. Ainsi, les méthodes établies en RMN ont inspiré de

nombreux développements dans des domaines très différents de la physique quantique, comme par exemple la spectroscopie laser, qu'il s'agisse de lasers continus ou de lasers à impulsions ultra-brèves.

Annexe A

Rappels mathématiques

Cette annexe regroupe quelques résultats mathématiques utilisés dans ce cours. Ce sont surtout les résultats eux-mêmes qui sont importants, les démonstrations parfois un peu techniques n'étant données ici qu'à titre de référence.

A.1 Conservation de la norme

Considérons un opérateur linéaire $\hat{U}$ agissant dans un espace de Hilbert et qui conserve la norme, ce qui signifie que pour tout ket $|\psi\rangle$ on a $\|\hat{U}|\psi\rangle\| = \|\psi\rangle\|$. Montrons qu'une telle propriété implique nécessairement la conservation du produit scalaire hermitien, soit $\langle\psi_1|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle$ pour tous kets $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$. Pour établir ce résultat, calculons les carrés des normes des superpositions $|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$ et $|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle$. On obtient

$$\| |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle \|^2 = (\langle\psi_1| + \langle\psi_2|)(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \langle\psi_1|\psi_1\rangle + \langle\psi_2|\psi_2\rangle + \langle\psi_1|\psi_2\rangle + \langle\psi_2|\psi_1\rangle \quad (\text{A.1})$$

$$\| |\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle \|^2 = (\langle\psi_1| - \langle\psi_2|)(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle) = \langle\psi_1|\psi_1\rangle + \langle\psi_2|\psi_2\rangle - \langle\psi_1|\psi_2\rangle - \langle\psi_2|\psi_1\rangle \quad (\text{A.2})$$

En soustrayant la seconde équation à la première puis en divisant par 2, on obtient

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle + \langle\psi_2|\psi_1\rangle = \frac{1}{2}\| |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle \|^2 - \frac{1}{2}\| |\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle \|^2. \quad (\text{A.3})$$

En appliquant la relation ainsi établie aux états $|\psi_1\rangle$ et $i|\psi_2\rangle$, on obtient

$$i\langle\psi_1|\psi_2\rangle - i\langle\psi_2|\psi_1\rangle = \frac{1}{2}\| |\psi_1\rangle + i|\psi_2\rangle \|^2 - \frac{1}{2}\| |\psi_1\rangle - i|\psi_2\rangle \|^2. \quad (\text{A.4})$$

Il suffit alors de diviser cette dernière équation par i , de l'ajouter à l'éq. A.3, puis de diviser encore par 2 pour obtenir le produit scalaire hermitien

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \frac{1}{4}\| |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle \|^2 - \frac{1}{4}\| |\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle \|^2 - \frac{i}{4}\| |\psi_1\rangle + i|\psi_2\rangle \|^2 + \frac{i}{4}\| |\psi_1\rangle - i|\psi_2\rangle \|^2. \quad (\text{A.5})$$

En appliquant cette dernière relation aux états $\hat{U}|\psi_1\rangle$ et $\hat{U}|\psi_2\rangle$ on obtiendra exactement le même second membre car l'opérateur linéaire $\hat{U}$ conserve la norme. On en déduit bien la relation annoncée $\langle\psi_1|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle$, qui signifie que l'opérateur $\hat{U}$ conserve le produit scalaire hermitien. Un

opérateur linéaire conservant la norme est donc nécessairement une isométrie.

En appliquant la relation ainsi établie aux états d'une base orthonormée $\{|n\rangle\}$, on en déduit $\langle n|\hat{U}^\dagger\hat{U}|m\rangle = \langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$, ce qui signifie que $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$. Dans le cas d'un espace de dimension N finie, cette relation permet d'en conclure que l'opérateur $\hat{U}$ est unitaire. En effet, en appliquant $\hat{U}$ aux N vecteurs de notre base orthonormée, on obtient une famille de N vecteurs $\hat{U}|n\rangle$ qui sont également orthonormés (par conservation du produit scalaire hermitien). Etant linéairement indépendants, ces N vecteurs constituent nécessairement une base de notre espace de dimension N . On peut donc écrire la relation de fermeture avec cette base, ce qui donne

$$\hat{I} = \sum_n \hat{U}|n\rangle\langle n|\hat{U}^\dagger = \hat{U} \sum_n |n\rangle\langle n|\hat{U}^\dagger = \hat{U}\hat{U}^\dagger, \quad (\text{A.6})$$

où l'on a utilisé la relation de fermeture sur la base $\{|n\rangle\}$. On en déduit que $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$, et donc que $\hat{U}$ est un opérateur unitaire car $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$.

Cependant, ce dernier résultat n'est pas toujours correct dans un espace de dimension infinie où il existe des opérateurs non inversibles (donc non unitaires) conservant la norme. Etant donné une base dénombrable $\{|n\rangle\}$, considérons par exemple l'opérateur

$$\hat{U} = \sum_n |n+1\rangle\langle n|, \quad (\text{A.7})$$

que l'on peut encore définir par la relation $\hat{U}|n\rangle = |n+1\rangle$. Pour un tel opérateur, on a bien

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \sum_{n,m} |n\rangle\langle n+1|m+1\rangle\langle m| = \sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{I}. \quad (\text{A.8})$$

Pour autant, l'opérateur n'est pas inversible, car $\hat{U}|0\rangle = 0$. Dans un espace de Hilbert de dimension infinie la relation $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$ ne suffit donc pas à affirmer que l'opérateur $\hat{U}$ est unitaire. En revanche, si on suppose en plus que $\hat{U}$ est inversible, alors il suffit de multiplier $\hat{U}^\dagger\hat{U}$ à droite par $\hat{U}^{-1}$ pour obtenir $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$. Enfin, en multipliant cette dernière égalité à gauche par $\hat{U}$, on en déduit la relation définissant un opérateur unitaire

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}. \quad (\text{A.9})$$

En conclusion, dans un espace de Hilbert de dimension finie, un opérateur linéaire conserve la norme si et seulement si l'opérateur est unitaire, ce qui se ramène à la relation $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$. Dans un espace de Hilbert de dimension infinie, un opérateur linéaire inversible conserve la norme si et seulement si l'opérateur est unitaire, ce qui signifie $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$, ou encore $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$.

A.2 Calcul de quelques intégrales utiles

A.2.1 Intégrale d'une fonction gaussienne

On considère la fonction gaussienne qui à x réel associe $\exp(-x^2/(2\sigma^2))$, où σ est un nombre réel positif. Pour calculer l'intégrale sur $\mathbb{R}$ de cette fonction, on peut par exemple écrire

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx = \sqrt{\iint_{\mathbb{R}^2} \exp\left(-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}\right) dx dy} \quad (\text{A.10})$$

$$= \sqrt{\int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\sigma^2}\right) \rho d\rho d\theta} \quad (\text{A.11})$$

$$= \sqrt{2\pi \left[-\sigma^2 \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\sigma^2}\right) \right]_0^{+\infty}}, \quad (\text{A.12})$$

soit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx = \sqrt{2\pi}\sigma. \quad (\text{A.13})$$

Ainsi la fonction définie par

$$g_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \quad (\text{A.14})$$

est une fonction gaussienne normalisée, ce qui signifie que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_\sigma(x) dx = 1. \quad (\text{A.15})$$

On pourra ainsi utiliser la fonction $g_\sigma(x)$ comme une densité de probabilité pour calculer des valeurs moyenne de toute fonction $f(x)$ selon l'expression

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) g_\sigma(x) dx. \quad (\text{A.16})$$

On a évidemment $\langle x \rangle = 0$ par parité. Par ailleurs,

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 g_\sigma(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x (x g_\sigma(x)) dx. \quad (\text{A.17})$$

Or, on peut remarquer que $dg_\sigma/dx = -(x/\sigma^2)g_\sigma(x)$. Donc la primitive de $xg_\sigma(x)$ s'écrit $-\sigma^2 g_\sigma(x)$. A l'aide d'une intégration par parties, on peut écrire l'éq. A.17 sous la forme

$$\langle x^2 \rangle = [-\sigma^2 x g_\sigma(x)]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma^2 g_\sigma(x) dx = \sigma^2. \quad (\text{A.18})$$

La densité de probabilité donnée par l'éq. A.14 est donc caractérisée par l'écart type $\Delta x = \sigma$.

Pour terminer, remarquons que l'éq. A.13 peut être étendue par prolongement analytique [45] au cas d'un nombre σ complexe, à condition que $\text{Re } \sigma^2$ soit strictement positif afin d'assurer la convergence de l'intégrale.

A.2.2 Intégrale de la fonction sinus cardinal

Etant donné un nombre réel k strictement positif, considérons la fonction sinus cardinal $x \mapsto \sin(kx)/x$, fonction paire dont la valeur maximale (atteinte en $x = 0$) est égale à k , et dont le premier zéro est atteint pour $kx = \pi$, soit $x = \pi/k$. Montrons que l'intégrale de cette fonction, de hauteur k et de largeur de l'ordre de π/k , est égale à π , soit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin kx}{x} dx = \pi. \quad (\text{A.19})$$

Pour cela, considérons pour $\alpha \in \mathbb{R}^+$ la fonction

$$I_\alpha(k) = 2 \int_0^{+\infty} e^{-\alpha x} \frac{\sin kx}{x} dx. \quad (\text{A.20})$$

L'intégrale recherchée s'écrit donc simplement $I_0(k)$, où nous avons utilisé la parité de la quantité intégrée dans l'éq. A.19. En dérivant $I_\alpha(k)$ par rapport à k , on obtient

$$\frac{dI_\alpha(k)}{dk} = 2 \int_0^{+\infty} e^{-\alpha x} \cos kx dx. \quad (\text{A.21})$$

Grâce au préfacteur exponentiel introduit à cet effet, cette intégrale est bien définie. On en déduit

$$\frac{dI_\alpha(k)}{dk} = \int_0^{+\infty} \left(e^{(ik-\alpha)x} + e^{(-ik-\alpha)x} \right) dx = \left[\frac{e^{(ik-\alpha)x}}{ik-\alpha} \right]_0^{+\infty} - \left[\frac{e^{-(ik+\alpha)x}}{ik+\alpha} \right]_0^{+\infty} \quad (\text{A.22})$$

soit

$$\frac{dI_\alpha(k)}{dk} = \frac{1}{\alpha + ik} + \frac{1}{\alpha - ik} = \frac{2\alpha}{\alpha^2 + k^2}. \quad (\text{A.23})$$

En intégrant par rapport à k , on obtient

$$I_\alpha(k) = 2 \arctan \frac{k}{\alpha}, \quad (\text{A.24})$$

où on a utilisé la condition initiale $I_\alpha(0) = 0$. Sachant que $k > 0$, on obtient pour $\alpha \rightarrow 0$ le résultat $I_0(k) = 2 \arctan(+\infty) = \pi$, ce qui établit bien l'éq. A.19.

A.3 Distribution (ou fonction) de Dirac

Paul Dirac a introduit une fonction $x \mapsto \delta(x)$, appelée *fonction de Dirac*, définie par la relation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x') \delta(x - x') dx' = \psi(x), \quad (\text{A.25})$$

vérifiée pour toute fonction ψ continue $x \mapsto \psi(x)$. En faisant le changement de variable $x' \rightarrow x - x'$, on peut encore écrire

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x - x') \delta(x') dx'. \quad (\text{A.26})$$

En d'autres termes, la fonction de Dirac est définie comme l'élément neutre pour le produit de convolution, soit $\psi * \delta = \psi$ pour toute fonction ψ . Par translation on peut également définir la fonction de Dirac centrée au point x , notée δ_x , par la relation

$$\delta_x(x') = \delta(x' - x) = \delta(x - x'). \quad (\text{A.27})$$

Pour toute fonction $\psi(x)$ continue on peut alors écrire

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x') \delta_x(x') dx'. \quad (\text{A.28})$$

On dit que la fonction $\delta_x(x')$ permet d'*échantillonner* la valeur prise par la fonction ψ au point x . L'intégrale intervenant dans l'éq. A.28 ne dépendant pas de la valeur prise par la fonction $\psi(x')$ aux points x' différents de x , on peut facilement en déduire⁽ⁱ⁾ que $\delta_x(x')$ s'annule pour toute valeur de $x' \neq x$. Par ailleurs, en faisant tendre la fonction $\psi(x')$ vers une valeur constante, on en déduit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta_x(x') dx' = 1. \quad (\text{A.29})$$

Le fait que l'intégrale de $\delta_x(x')$ soit égale à 1 alors que cette fonction est nulle partout implique que $\delta_x(x) = +\infty$. En résumé, la fonction $\delta_x(x')$ est une fonction nulle partout sauf en $x' = x$, où elle prend une valeur infinie. Sachant que $\delta_x(x') = \delta(x' - x)$, on en déduit que la fonction de Dirac est nulle partout, sauf en zéro où elle prend une valeur infinie, avec en outre la condition

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (\text{A.30})$$

La fonction de Dirac n'est donc pas une véritable fonction au sens mathématique du terme.

La théorie des distributions [46] permet de donner une base mathématique rigoureuse à cette notion de fonction de Dirac. On peut ainsi définir ce qu'on appelle la *distribution de Dirac* δ_x comme une forme linéaire appartenant à l'espace dual $\mathcal{E}_H^*$ dont l'action sur une fonction continue ψ de $\mathcal{E}_H = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ donne la valeur $\psi(x)$ prise par la fonction considérée au point x . En exprimant cette définition dans le cadre du formalisme de Dirac utilisé en physique quantique, on peut définir la distribution de Dirac comme le bra $\langle \delta_x |$ tel que l'action de ce bra sur le ket $|\psi\rangle$ soit la valeur $\psi(x) = \langle \delta_x | \psi \rangle$ prise par la fonction au point x . Pour construire le bra $\langle \delta_x |$, considérons pour $\epsilon > 0$ la fonction représentée Fig. A.1 qui à x' associe $\delta_x^{(\epsilon)}(x') = \delta^{(\epsilon)}(x' - x)$, par définition égale à $1/\epsilon$ pour $|x' - x| \leq \epsilon/2$ et nulle à l'extérieur de cet intervalle (la fonction $\delta^{(\epsilon)}$ étant quant à elle une fonction paire centrée sur l'origine). La fonction $\delta_x^{(\epsilon)}$, dont l'intégrale est égale à 1, permet de calculer la valeur moyenne prise par toute fonction dans un petit voisinage autour du point x à l'aide du produit scalaire hermitien

$$\langle \delta_x^{(\epsilon)} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_x^{(\epsilon)}(x') \psi(x') dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\epsilon)}(x' - x) \psi(x') dx' = \frac{1}{\epsilon} \int_{x-\epsilon/2}^{x+\epsilon/2} \psi(x') dx'. \quad (\text{A.31})$$

⁽ⁱ⁾ On peut par exemple remplacer $\psi(x')$ par une suite de gaussiennes centrées en x et de largeurs tendant vers zéro, de sorte que $\psi(x')$ tend vers zéro pour $x' \neq x$.

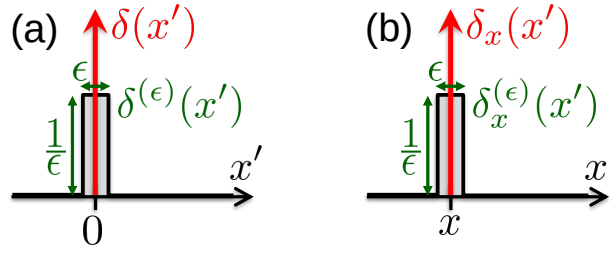


FIGURE A.1 – Représentation de la fonction qui à x' associe (a) $\delta^{(\epsilon)}(x')$ et (b) $\delta_x^{(\epsilon)}(x') = \delta^{(\epsilon)}(x' - x)$. Les flèches verticales correspondent à la représentation schématique de la limite de ces fonctions lorsque ϵ tend vers 0.

La Fig. A.2 représente cette moyenne glissante, qui est proche de $\psi(x)$ dès lors que ϵ est suffisamment petit. On peut en effet observer sur la figure que la fonction initiale est assez bien reproduite, même si ses variations les plus rapides sont lissées sous l'effet du produit de convolution.

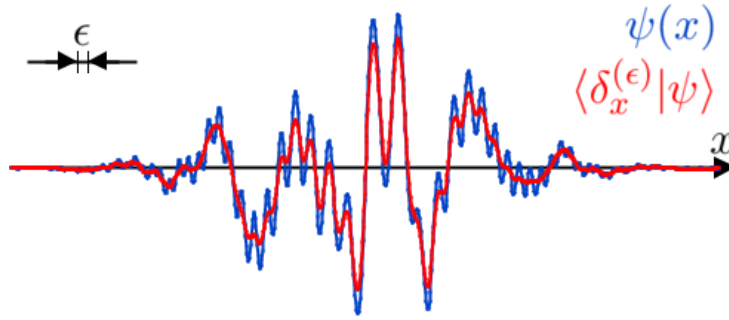


FIGURE A.2 – Représentation de la fonction $\psi(x)$ (en bleu) et de $\langle \delta_x^{(\epsilon)} | \psi \rangle$ (en rouge) en fonction de x .

On peut montrer que lorsque la grandeur ϵ tend vers zéro, cette moyenne glissante sur un intervalle de plus en plus petit va converger vers la valeur exacte de la fonction $\psi(x)$, ce que l'on peut écrire sous la forme

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \delta_x^{(\epsilon)} | \psi \rangle = \psi(x). \quad (\text{A.32})$$

Il est ainsi possible de donner une définition rigoureuse du bra $\langle \delta_x |$ à l'aide de l'expression

$$\langle \delta_x | = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \delta_x^{(\epsilon)} |. \quad (\text{A.33})$$

Compte tenu de l'éq. A.32, on pourra alors écrire l'action de la distribution de Dirac selon

$$\langle \delta_x | \psi \rangle = \psi(x). \quad (\text{A.34})$$

Considérons maintenant le ket $|\delta_x\rangle$ correspondant. La fonction associée à ce ket s'écrit *a priori*

$$\delta_x(x') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_x^{(\epsilon)}(x'). \quad (\text{A.35})$$

Comme évoqué plus haut, le problème est que cette fonction n'en est pas une. En effet, la grandeur $\delta_x(x')$ est nulle dans tout l'espace, sauf en $x' = x$ où elle prend une valeur infinie (c'est à dire qu'elle

n'est pas définie au seul point où elle est non nulle). Un usage largement répandu en physique consiste néanmoins à faire *comme si* la distribution de Dirac était une fonction comme une autre et à écrire sans vergogne des équations comme l'éq. A.26. Il ne s'agit en fait que d'une notation, qui ne pose pas de problème tant qu'on utilise la fonction de Dirac pour calculer des intégrales.

Bien évidemment, la fonction de Dirac n'appartient pas à $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Bien qu'elle soit sommable (selon l'éq. A.30), la fonction de Dirac n'est pas de carré sommable puisque

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) \delta(x) dx = \delta(0) = +\infty. \quad (\text{A.36})$$

Il est tout à fait possible d'écrire la fonction de Dirac comme une limite d'autres séries de fonctions à la place des fonctions rectangulaire $\delta^{(\epsilon)}(x)$ introduites plus haut. Considérons par exemple la fonction

$$f^{(\epsilon)}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-1/\epsilon}^{1/\epsilon} e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{e^{ikx}}{ix} \right]_{-1/\epsilon}^{1/\epsilon} = \frac{e^{ix/\epsilon} - e^{-ix/\epsilon}}{2i\pi x}, \quad (\text{A.37})$$

soit le sinus cardinal

$$f^{(\epsilon)}(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin \frac{x}{\epsilon}}{x}. \quad (\text{A.38})$$

D'après l'éq. A.19, on a bien la condition de normalisation souhaitée

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^{(\epsilon)}(x) dx = 1. \quad (\text{A.39})$$

Sachant que la largeur de la fonction $f^{(\epsilon)}(x)$, de l'ordre de ϵ , tend vers zéro quand ϵ tend vers zéro, on peut donc écrire

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} f^{(\epsilon)}(x). \quad (\text{A.40})$$

En remplaçant ϵ par 0 dans l'intégrale apparaissant dans l'éq. A.37, on obtient donc

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk, \quad (\text{A.41})$$

ce qui constitue une autre définition très utile de la fonction de Dirac. En prenant le complexe conjugué et en échangeant les rôles joués par x et k , on pourra encore écrire

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} dx. \quad (\text{A.42})$$

Une autre expression utile peut être obtenue à partir de l'éq. A.41 en intégrant non pas sur le vecteur d'onde k mais sur l'impulsion $p = \hbar k$. Compte tenu du changement de variable dans l'élément d'intégration, on obtient

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar} dp. \quad (\text{A.43})$$

On peut en déduire les relations

$$\mathcal{F}\delta(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad \text{et} \quad \mathcal{F}^{-1}\delta(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (\text{A.44})$$

A.4 Transformée de Fourier d'une gaussienne

Considérons l'équation différentielle du premier ordre

$$\frac{d\psi}{dx} + \frac{x}{2\sigma^2}\psi(x) = 0, \quad (\text{A.45})$$

où σ est un nombre réel positif. La solution de cette équation différentielle peut s'obtenir en remarquant qu'il s'agit d'une équation aux variables séparables

$$\frac{d\psi}{\psi} = -\frac{x dx}{2\sigma^2} \quad (\text{A.46})$$

dont la solution s'écrit $\ln(\psi(x)/\psi(0)) = -x^2/(4\sigma^2)$, soit la gaussienne

$$\psi(x) = \psi(0) \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right). \quad (\text{A.47})$$

Compte tenu de ce résultat, on dira que l'éq. A.45 est l'équation génératrice des gaussiennes. Pour déterminer $\psi(0)$, imposons à l'amplitude de probabilité $\psi(x)$ d'être normalisée, soit

$$\int |\psi(x)|^2 dx = |\psi(0)|^2 \int \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx = 1. \quad (\text{A.48})$$

Compte tenu de l'éq. A.13, on obtient une amplitude de probabilité convenablement normalisée en choisissant par exemple $\psi(0) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4}$, soit

$$\psi(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right). \quad (\text{A.49})$$

Cherchons maintenant la transformée de Fourier $\tilde{\psi}(p)$ de cette fonction gaussienne. Pour cela, écrivons la transformée de Fourier de l'éq. A.45, en nous aidant des éq. 5.18 et 5.20, soit

$$\frac{ip}{\hbar} \tilde{\psi}(p) + \frac{i\hbar}{2\sigma^2} \frac{d\tilde{\psi}}{dp} = 0, \quad (\text{A.50})$$

ou encore

$$\frac{d\tilde{\psi}}{dp} + \frac{2\sigma^2}{\hbar^2} \tilde{\psi}(p) = 0. \quad (\text{A.51})$$

Cette équation a exactement la même forme que l'éq. A.45, à condition de remplacer σ^2 par $\hbar^2/(4\sigma^2)$. On en déduit que $\tilde{\psi}(p)$ est la gaussienne

$$\tilde{\psi}(p) = \tilde{\psi}(0) \exp\left(-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2}\right). \quad (\text{A.52})$$

Pour déterminer $\tilde{\psi}(0)$, écrivons l'éq. 5.7 dans le cas $p = 0$, ce qui nous donne

$$\tilde{\psi}(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) dx = \frac{\psi(0)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-x^2/(4\sigma^2)} dx = \frac{\psi(0)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{2\pi} \sqrt{2\sigma} = \sqrt{\frac{2}{\hbar}} \sigma \psi(0), \quad (\text{A.53})$$

où nous avons utilisé l'éq. A.13 en remplaçant σ par $\sqrt{2}\sigma$. On en déduit

$$\tilde{\psi}(p) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2}\right). \quad (\text{A.54})$$

Les éq. A.49 et A.54 nous fournissent donc deux amplitudes de probabilité $\psi(x)$ et $\tilde{\psi}(p)$ conjuguées par transformée de Fourier. Les densités de probabilité associées nous permettent de calculer les moyennes de fonctions de x ou de p . Compte tenu des résultats établis en A.2.1, on peut écrire $\Delta x = \sigma$ ainsi que $\Delta p = \hbar/(2\sigma)$. On en déduit en particulier que

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}, \quad (\text{A.55})$$

ce qui nous permet de vérifier qu'une fonction gaussienne réelle sature l'inégalité de Heisenberg. Par prolongement analytique [45], on peut enfin montrer que la relation

$$\mathcal{F} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right) = \sqrt{\frac{2}{\hbar}} \sigma \exp\left(-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2}\right) \quad (\text{A.56})$$

que nous avons établie pour $\sigma \in \mathbb{R}^+$ est en fait valable pour $\sigma \in \mathbb{C}$, à condition de supposer que $\text{Re } \sigma^2 > 0$ pour assurer que la gaussienne reste de carré sommable. Cette relation permet notamment de calculer explicitement la propagation d'un paquet d'ondes gaussien.

On peut même considérer le cas limite où $\text{Re } \sigma^2 \rightarrow 0$. Posons dans ce cas $\sigma^2 = i/(2\alpha)$, où $\alpha \in \mathbb{R}^+$, et donc $\sigma = e^{i\pi/4}/\sqrt{2\alpha}$. En remplaçant dans l'éq. A.56, on obtient

$$\mathcal{F} \exp\left(i\frac{\alpha x^2}{2}\right) = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{\alpha\hbar}} \exp\left(-i\frac{p^2}{2\alpha\hbar^2}\right). \quad (\text{A.57})$$

Les deux fonctions intervenant dans cette équation ne sont pas de carré sommable, mais elles n'en sont pas moins transformées de Fourier l'une de l'autre et jouent un rôle utile pour la propagation d'un faisceau lumineux (voir annexe B.2) ou l'étalement d'un paquet d'ondes (voir annexe B.3).

Annexe B

Quelques démonstrations techniques

Cette annexe réunit les démonstrations de quelques résultats qui ont été admis dans le corps du document. Bien que ces démonstrations ne soient pas indispensables à une bonne compréhension de ce cours de physique quantique, elles pourront éventuellement répondre à certaines de vos questions.

B.1 Ondes électromagnétiques dans le vide

La propagation des ondes électromagnétiques dans le vide est gouvernée par les équations de Maxwell [47], qui s'expriment dans le vide selon les quatre équations

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = 0, \quad (\text{B.1})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0, \quad (\text{B.2})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial \vec{B}(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (\text{B.3})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (\text{B.4})$$

où c est la vitesse de la lumière dans le vide et le symbole $\times$ représente le produit vectoriel, de sorte que $\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r})$ correspond au rotationnel du champ de vecteurs $\vec{A}(\vec{r})$. La démarche habituelle pour établir une équation de propagation portant sur le champ électrique $\vec{E}(\vec{r}, t)$ consiste à prendre le rotationnel de l'éq. B.3 en s'aidant de l'identité $\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) - \Delta \vec{E} = -\Delta \vec{E}$, où l'on a aussi utilisé l'éq. B.1. On obtient alors

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\Delta \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \times \vec{B} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \quad (\text{B.5})$$

ce qui nous permet de retrouver l'équation de d'Alembert (eq. 1.7)

$$\Delta \vec{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}. \quad (\text{B.6})$$

Il s'agit là d'une équation différentielle du second ordre en temps portant sur le seul champ électrique. On obtient une équation identique portant sur le champ magnétique en prenant le rotationnel de l'éq. B.4. Toutefois, il est tout à fait possible de décrire ce même phénomène de propagation des ondes électromagnétiques à l'aide d'une équation différentielle du premier ordre en temps, à condition de

considérer simultanément le champ électrique $\vec{E}(\vec{r}, t)$ et le champ magnétique $\vec{B}(\vec{r}, t)$, tous deux nécessaires pour décrire complètement l'état du système. On peut en effet directement reformuler les éq. B.3 et B.4 selon

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \\ cB_x \\ cB_y \\ cB_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -c\partial/\partial z & c\partial/\partial y \\ 0 & 0 & 0 & c\partial/\partial z & 0 & -c\partial/\partial x \\ 0 & 0 & 0 & -c\partial/\partial y & c\partial/\partial x & 0 \\ 0 & c\partial/\partial z & -c\partial/\partial y & 0 & 0 & 0 \\ -c\partial/\partial z & 0 & c\partial/\partial x & 0 & 0 & 0 \\ c\partial/\partial y & -c\partial/\partial x & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \\ cB_x \\ cB_y \\ cB_z \end{pmatrix}. \quad (\text{B.7})$$

Cette expression se met donc sous la forme

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{F} \psi(\vec{r}, t), \quad (\text{B.8})$$

où $\psi(\vec{r}, t)$ est un vecteur à six composantes réunissant les composantes cartésiennes des champs électrique et magnétique, tandis que l'opérateur $\hat{F}$ est la matrice 6×6 apparaissant dans le second membre de l'éq. B.7. Cette équation différentielle reliant la dérivée première de l'état $\psi(\vec{r}, t)$ à l'action d'un opérateur linéaire $\hat{F}$ sur ce même état est ainsi formellement similaire à l'équation de Schrödinger (eq. 3.83).

B.2 Equation de Helmholtz en régime paraxiale

On considère l'équation de Helmholtz

$$\Delta \varphi(\vec{r}) + k^2 \varphi(\vec{r}) = 0 \quad (\text{B.9})$$

où $k = \omega/c$. Nous savons que toute onde plane associée à un vecteur d'onde dont la norme est égale à k est solution de cette équation. Toutefois, une onde plane occupe l'ensemble de l'espace et n'est donc pas une solution physique car la fonction $\varphi(\vec{r})$ correspondante n'est pas de carré sommable. Nous allons nous intéresser ici à une solution de carré sommable (dans le plan xy) de l'équation de Helmholtz qui soit proche d'une onde plane se propageant selon l'axe z . Ecrivons donc

$$\varphi(\vec{r}) = u(\vec{r}) e^{ikz} \quad (\text{B.10})$$

où $u(\vec{r})$ est une enveloppe variant lentement à l'échelle de la longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$. Nous avons

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = \left(\frac{\partial u}{\partial z} + ik u(\vec{r}) \right) e^{ikz} \quad (\text{B.11})$$

et

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + 2ik \frac{\partial u}{\partial z} - k^2 u(\vec{r}) \right) e^{ikz}. \quad (\text{B.12})$$

Le Laplacien de $\varphi(\vec{r})$ s'écrit donc

$$\Delta \varphi(\vec{r}) = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + 2ik \frac{\partial u}{\partial z} - k^2 u(\vec{r}) \right) e^{ikz}. \quad (\text{B.13})$$

En remplaçant dans l'équation de Helmholtz puis en divisant par $\exp(ikz)$, on obtient donc une nouvelle équation portant sur l'enveloppe $u(x, y, z)$:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + 2ik \frac{\partial u}{\partial z} = 0. \quad (\text{B.14})$$

Dans la mesure où l'enveloppe $u(x, y, z)$, de même que sa dérivée, varie lentement en fonction de z , on peut considérer que la variation de $\partial u / \partial z$ sur une longueur d'onde λ est faible, soit

$$\left| \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right| \lambda \ll \left| \frac{\partial u}{\partial z} \right|, \quad (\text{B.15})$$

ce que l'on peut encore écrire

$$\left| \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right| \ll k \left| \frac{\partial u}{\partial z} \right|. \quad (\text{B.16})$$

Cette relation nous permet de négliger la dérivée seconde de u dans l'éq. B.14, ce qui nous donne l'équation de propagation dans le cadre de l'approximation paraxiale [47],

$$2ik \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0. \quad (\text{B.17})$$

Cette équation de propagation est parfaitement similaire à l'équation de Schrödinger pour une particule libre se déplaçant dans un espace bidimensionnel,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) = 0, \quad (\text{B.18})$$

à condition de remplacer le temps t par la coordonnée z . On peut donc résoudre l'équation paraxiale en utilisant la même méthode de résolution que pour l'équation de Schrödinger, en se plaçant dans l'espace de Fourier. Introduisons donc la transformée de Fourier de $u(x, y, z)$ par rapport aux deux variables x et y ,

$$\tilde{u}(k_x, k_y, z) = \frac{1}{2\pi} \iint u(x, y, z) \exp(-i(k_x x + k_y y)) dx dy. \quad (\text{B.19})$$

Comme il s'agit ici d'optique et non de mécanique quantique, l'espace de Fourier sera décrit par le vecteur d'onde plutôt que par l'impulsion. On pourra toutefois utiliser toutes les formules énoncées en 5.1 à condition de remplacer $\hbar$ par l'unité. Dans l'espace de Fourier, l'éq. B.17 devient donc

$$2ik \frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} - (k_x^2 + k_y^2) \tilde{u}(k_x, k_y, z) = 0. \quad (\text{B.20})$$

La solution de cette équation différentielle du premier ordre s'écrit immédiatement

$$\tilde{u}(k_x, k_y, z) = \tilde{u}(k_x, k_y, 0) \exp \left(-i \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k} z \right). \quad (\text{B.21})$$

Comme pour l'équation de Schrödinger, on dispose ainsi d'une méthode de résolution générale de l'équation de propagation en géométrie paraxiale. Etant donnée la condition initiale $u(x, y, 0)$, soit le profil du faisceau dans le plan $z = 0$, il suffit de calculer la transformée de Fourier $\tilde{u}(k_x, k_y, 0)$, puis de lui appliquer une phase quadratique selon l'éq. B.21 afin de déterminer $\tilde{u}(k_x, k_y, z)$ pour

toute valeur de z , puis de revenir dans l'espace direct à l'aide d'une transformée de Fourier inverse pour déterminer $u(x, y, z)$. C'est par exemple de cette manière que l'on peut déterminer la solution générale d'un problème de diffraction comme celui représenté Fig. 1.2.

On peut également écrire directement la solution de l'équation de propagation paraxiale dans l'espace direct. Pour cela, remarquons que l'expression de $\tilde{u}(k_x, k_y, z)$ donnée par l'éq. B.21 peut se mettre sous la forme du produit $\tilde{u}(k_x, k_y, 0)\tilde{f}(k_x, k_y)$, où $\tilde{f}(k_x, k_y) = \exp(-i(k_x^2 + k_y^2)z/(2k))$. La solution dans l'espace direct peut donc s'écrire sous la forme du produit de convolution

$$u(x, y, z) = \frac{1}{2\pi} f(x, y) * u(x, y, 0). \quad (\text{B.22})$$

où $f(x, y) = \mathcal{F}^{-1}\tilde{f}(k_x, k_y)$. Remarquons que le facteur $1/\sqrt{2\pi}$ apparaissant dans l'éq. 5.35 devient ici $1/(2\pi)$ car nous avons affaire à une transformée de Fourier à deux dimensions spatiales. Par ailleurs, d'après l'éq. A.57

$$f(x, y) = \mathcal{F}^{-1}g(k_x, k_y) = \frac{k}{z} e^{-i\pi/2} \exp\left(ik \frac{x^2 + y^2}{2z}\right), \quad (\text{B.23})$$

où l'on a posé $\alpha = k/z$ et remplacé le préfacteur $\sqrt{\alpha\hbar}e^{-i\pi/4}$ par $\alpha = ke^{-i\pi/2}/z$ (toujours en raison des deux dimensions spatiales). On en déduit

$$u(x, y, z) = -\frac{i}{\lambda z} \iint u(x', y', 0) \exp\left(ik \frac{(x-x')^2 + (y-y')^2}{2z}\right) dx' dy' \quad (\text{B.24})$$

et

$$\varphi(x, y, z) = -\frac{i}{\lambda z} \iint \varphi(x', y', 0) \exp\left(ik \left(z + \frac{(x-x')^2 + (y-y')^2}{2z}\right)\right) dx' dy'. \quad (\text{B.25})$$

On reconnaît l'expression du principe de Huyghens-Fresnel dans le cadre de l'approximation de Fresnel, dont on montre ici qu'elle est équivalente à l'approximation paraxiale. Dans ce cadre, la distance entre le point source, située au point $(x', y', 0)$, et le point d'observation, situé au point (x, y, z) peut s'écrire

$$r = \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + z^2} \approx z + \frac{(x-x')^2 + (y-y')^2}{2z}, \quad (\text{B.26})$$

ce qui explique le facteur de phase apparaissant dans l'éq. B.25. L'approximation dite de Fraunhofer consiste à supposer que $z \gg k\Delta x^2$ et $z \gg k\Delta y^2$, où Δx et Δy représente l'extension latérale du faisceau lumineux dans le plan transverse en $z = 0$. On peut alors négliger le terme $k(x'^2 + y'^2)/(2z)$ dans l'exponentielle et écrire

$$u(x, y, z) = -\frac{i}{\lambda z} \exp\left(ik \frac{x^2 + y^2}{2z}\right) \iint u(x', y', 0) \exp\left(-ik \frac{xx' + yy'}{z}\right) dx' dy'. \quad (\text{B.27})$$

On reconnaît ici la transformée de Fourier bidimensionnelle de $u(x', y', 0)$ prise au point $(k_x = kx/z, k_y = ky/z)$, soit

$$u(x, y, z) \approx -\frac{ik}{z} \exp\left(ik \frac{x^2 + y^2}{2z}\right) \tilde{u}\left(\frac{kx}{z}, \frac{ky}{z}, 0\right). \quad (\text{B.28})$$

On retrouve donc ce résultat bien connu de la diffraction de Fraunhofer : Lorsque l'écran est placé suffisamment loin de l'objet diffractant, l'intensité lumineuse observée n'est autre que la transformée de Fourier de l'objet diffractant.

B.3 Etalement d'un paquet d'ondes libre

D'après l'éq. 5.69, la propagation d'un paquet d'ondes libre est gouvernée par l'expression

$$\tilde{\psi}(p, t) = \tilde{\psi}(p, 0) \exp \left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t \right) = \tilde{\psi}(p, 0) \tilde{f}(p, t) \quad (\text{B.29})$$

où la fonction $\tilde{f}(p, t)$ est définie par

$$\tilde{f}(p, t) = \exp \left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t \right). \quad (\text{B.30})$$

Cela signifie qu'au cours de la propagation la fonction $\tilde{\psi}(p, t)$ acquiert une phase quadratique (*i.e.* proportionnelle à p^2) augmentant linéairement au cours du temps, ce qui va naturellement modifier la forme du paquet d'ondes. D'après l'éq. 5.35, le produit associé à l'éq. B.29 devient un produit de convolution dans l'espace des x , soit

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x, 0) * f(x, t) \quad (\text{B.31})$$

où

$$f(x, t) = \mathcal{F}^{-1} \tilde{f}(p, t) = \sqrt{\frac{m}{t}} e^{-i\pi/4} \exp \left(i \frac{mx^2}{2\hbar t} \right) \quad (\text{B.32})$$

où l'on a utilisé l'éq. A.57 pour calculer la transformée de Fourier inverse de $\tilde{f}(p, t)$, avec $\alpha = m/(\hbar t)$. On en déduit

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}} e^{-i\pi/4} \int \psi(x', 0) \exp \left(i \frac{m(x - x')^2}{2\hbar t} \right) dx'. \quad (\text{B.33})$$

Cette expression donnant la fonction d'onde sous forme d'un produit de convolution est similaire à l'éq. B.25 obtenue dans le cadre de la diffraction de Fresnel. Nous pouvons maintenant faire une approximation similaire à l'approximation de Fraunhofer en optique, en supposant que le temps est suffisamment long pour qu'on puisse négliger le terme en $mx'^2/(2\hbar t)$ résultant du développement de $(x - x')^2$ dans l'exponentielle complexe. Cette approximation sera *a priori* valable pour $m\Delta x^2/(2\hbar t) \ll 1$, soit pour des temps t suffisamment longs. On peut alors écrire

$$\psi(x, t) \approx \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}} e^{-i\pi/4} \exp \left(i \frac{mx^2}{2\hbar t} \right) \int \psi(x', 0) \exp \left(-i \frac{mx'x'}{\hbar t} \right) dx'. \quad (\text{B.34})$$

On reconnaît ici la transformée de Fourier de $\psi(x', 0)$ prise en $p = mx/t$. On obtient finalement

$$\psi(x, t) \approx \sqrt{\frac{m}{t}} e^{-i\pi/4} \exp \left(i \frac{mx^2}{2\hbar t} \right) \tilde{\psi} \left(\frac{mx}{t}, 0 \right), \quad (\text{B.35})$$

ce qui nous permet de retrouver l'éq. 5.83 : pour un temps suffisamment long, la densité de probabilité de la particule $|\psi(x, t)|^2$ reproduit la densité de probabilité de l'impulsion $|\tilde{\psi}(p, 0)|^2$ pour $p = mx/t$.

Revenons maintenant au cas général d'un temps t quelconque. L'éq. 5.69 permet également de calculer l'écart type du paquet d'ondes. Pour cela, calculons la moyenne de x^2

$$\langle x^2 \rangle_t = \int |x\psi(x, t)|^2 dx = \hbar^2 \int \left| \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial p} \right|^2 dp, \quad (\text{B.36})$$

où nous avons utilisé le théorème de Parseval-Plancherel ainsi que l'éq. 5.20. En utilisant l'éq. 5.77 pour exprimer $\partial \tilde{\psi} / \partial p$, on en déduit

$$\langle x^2 \rangle_t = \hbar^2 \int \left| \frac{\partial \tilde{\psi}(p, 0)}{\partial p} \exp \left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t \right) - i \frac{p}{m\hbar} t \tilde{\psi}(p, t) \right|^2 dp. \quad (\text{B.37})$$

Il s'agit d'un polynôme du second degré en t , le terme en t^2 faisant apparaître la valeur moyenne $\langle p^2 \rangle$. On peut donc écrire

$$\langle x^2 \rangle_t = \frac{\langle p^2 \rangle}{m^2} t^2 + Bt + \langle x^2 \rangle_{t=0}. \quad (\text{B.38})$$

Par ailleurs, d'après l'éq. 5.79, on peut écrire

$$\langle x \rangle_t^2 = \frac{\langle p \rangle^2}{m^2} t^2 + 2 \frac{\langle p \rangle \langle x \rangle_{t=0}}{m} t + \langle x \rangle_{t=0}^2. \quad (\text{B.39})$$

On en déduit

$$\Delta x_t^2 = \langle x^2 \rangle_t - \langle x \rangle_t^2 = \frac{\Delta p^2}{m^2} t^2 + B't + \Delta x_{t=0}^2. \quad (\text{B.40})$$

Quelle que soit la forme du paquet d'ondes, la variance Δx_t^2 aura donc une forme parabolique. Choisissons l'origine des temps de sorte que le minimum de cette parabole soit atteint en $t = 0$, instant où le paquet d'ondes sera dit minimal. Cela revient à faire l'hypothèse $B' = 0$, et nous donne l'expression générale

$$\Delta x_t = \sqrt{\Delta x_{t=0}^2 + \frac{\Delta p^2}{m^2} t^2}. \quad (\text{B.41})$$

Il s'agit d'une hyperbole dont le comportement au temps long tend vers l'asymptote

$$\Delta x_t \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{\Delta p}{m} t. \quad (\text{B.42})$$

B.4 Clivage des niveaux d'énergie dans un puits double

L'objet de cette annexe est d'établir le résultat admis en 6.4.4 donnant le clivage entre les deux premiers niveaux d'énergie d'un double puits. On se place dans le cas d'une barrière de grande épaisseur ($\kappa\Delta \gg 1$), ce qui nous permet d'écrire

$$\tanh \frac{\kappa\Delta}{2} = \frac{e^{\kappa\Delta/2} - e^{-\kappa\Delta/2}}{e^{\kappa\Delta/2} + e^{-\kappa\Delta/2}} = (1 - e^{-\kappa\Delta}) (1 + e^{-\kappa\Delta})^{-1} \approx 1 - 2e^{-\kappa\Delta}, \quad (\text{B.43})$$

avec $e^{-\kappa\Delta} \ll 1$. De même,

$$\coth \frac{\kappa\Delta}{2} = \frac{1}{\tanh \frac{\kappa\Delta}{2}} \approx 1 + 2e^{-\kappa\Delta}. \quad (\text{B.44})$$

Les éq. 6.36 et 6.39 obtenues en 6.4.4 décrivant les conditions de quantification dans les cas pair et impair peuvent donc être réunies en une seule équation

$$\tan kL = -\frac{k}{\kappa} (1 \pm 2e^{-\kappa\Delta}), \quad (\text{B.45})$$

le signe positif correspondant aux solutions paires tandis que le signe négatif correspond aux solutions impaires. Cette relation peut encore s'écrire

$$\kappa = - (1 \pm 2e^{-\kappa\Delta}) k \cotan kL. \quad (\text{B.46})$$

On retrouve l'éq. 6.27 obtenue dans le cas du puits semi-infini, à la nuance près que le membre de droite est multiplié par le facteur $1 \pm 2e^{-\kappa\Delta}$, qui est très légèrement supérieur (resp. inférieur) à 1 dans le cas d'une solution paire (resp. impaire). Comme on peut le vérifier sur la Fig. 6.7 cela aura pour effet de déplacer le point d'intersection avec le cercle vers des valeurs de kL très légèrement plus petites (resp. plus grandes) que celles obtenues pour le puits semi-infini. On en déduit que l'énergie $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ sera très légèrement plus petite (resp. plus grande). Ainsi, notre modèle rend parfaitement compte du clivage observé sur la Fig. 6.13. On explique également pour quelle raison le clivage est plus important pour la paire de niveaux situées à plus haute énergie, pour laquelle $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ est plus petit et donc $e^{-\kappa\Delta}$ est plus grand. L'onde évanescence s'atténuant moins vite dans ce cas, le couplage par effet tunnel sera plus prononcé pour ces niveaux plus proches du sommet de la barrière. Remarquons enfin que le niveau fondamental, correspondant à un état pair, verra son énergie diminuée par rapport au cas de deux puits semi-infinis non couplés.

Toujours pour une barrière de grande épaisseur, supposons enfin que $E \ll V_0$ (ce qui peut encore s'écrire $k \ll \kappa$), et cherchons les deux premiers niveaux d'énergie du double puits. Dans le cas extrême où $\kappa \rightarrow +\infty$, la condition de quantification devient $\tan kL \approx 0$, ce qui nous redonne les niveaux d'un puits infini. Dans le cas qui nous intéresse où κ est fini mais très grand devant k , on peut en conclure que kL sera très proche de π pour les deux premiers niveaux. En utilisant le développement limité $\tan kL \approx kL - \pi$ pour kL proche de π , on peut remplacer l'éq. B.45 par la forme approchée

$$kL - \pi \approx -\frac{k}{\kappa} (1 \pm 2e^{-\kappa\Delta}) \quad (\text{B.47})$$

ou encore

$$kL \left(1 + \frac{1 \pm 2e^{-\kappa\Delta}}{\kappa L} \right) = \pi. \quad (\text{B.48})$$

La solution s'écrit

$$k_{\pm} = \frac{\pi}{L \left(1 + \frac{1 \pm 2e^{-\kappa_{\pm}\Delta}}{\kappa_{\pm} L} \right)}, \quad (\text{B.49})$$

où $\kappa_{\pm}$ est lié à $k_{\pm}$ par la relation $k_{\pm}^2 + \kappa_{\pm}^2 = k_0^2$, avec $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$. Sachant que $\kappa_{\pm}L \gg k_{\pm}L \approx \pi$, on en déduit l'énergie

$$\frac{\hbar^2 k_{\pm}^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(1 - \frac{2}{\kappa_{\pm} L} (1 \pm 2e^{-\kappa_{\pm}\Delta}) \right). \quad (\text{B.50})$$

La grandeur $\kappa_{\pm}$ étant fonction de $k_{\pm}$, on ne dispose pas à ce stade d'une expression explicite de l'énergie du système. Toutefois, sachant que $k_{\pm}$ est très proche de π/L , on sait que $\kappa_{\pm}$ est lui-même

très proche d'une valeur centrale κ . Posons donc $\kappa_{\pm} = \kappa \pm \delta\kappa$ et supposons $\delta\kappa \ll \kappa$. On en déduit

$$\frac{\hbar^2 k_{\pm}^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(1 - \frac{2}{\kappa L} \left(1 \mp \frac{\delta\kappa}{\kappa} \right) (1 \pm 2e^{-\kappa\Delta} (1 \mp \delta\kappa\Delta)) \right) \quad (\text{B.51})$$

$$\approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(1 - \frac{2}{\kappa L} \left(1 \mp \frac{\delta\kappa}{\kappa} \pm 2e^{-\kappa\Delta} - 2e^{-\kappa\Delta} \delta\kappa\Delta \right) \right), \quad (\text{B.52})$$

où l'on a supposé en outre $\delta\kappa\Delta \ll 1$. On en déduit le clivage entre les deux premiers niveaux

$$E_A - E_S = \frac{\hbar^2 k_-^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_+^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(\frac{8e^{-\kappa\Delta}}{\kappa L} - \frac{4\delta\kappa}{\kappa^2 L} \right). \quad (\text{B.53})$$

Il nous reste à évaluer $\delta\kappa$ à l'aide de la relation $k_{\pm}^2 + \kappa_{\pm}^2 = k_0^2$. On obtient

$$k_-^2 - k_+^2 = \kappa_+^2 - \kappa_-^2 = (\kappa_+ + \kappa_-)(\kappa_+ - \kappa_-) = 4\kappa\delta\kappa, \quad (\text{B.54})$$

soit $\delta\kappa = (k_-^2 - k_+^2)/(4\kappa)$. Le terme correspondant dans l'éq. B.53 s'écrit donc

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \frac{4\delta\kappa}{\kappa^2 L} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (k_-^2 - k_+^2)}{2m} \frac{1}{\kappa^3 L^3} = \frac{1}{\kappa^3 L^3} (E_A - E_S). \quad (\text{B.55})$$

En faisant passer ce terme dans le membre de gauche de l'éq. B.53, on en déduit

$$\left(1 + \frac{1}{\kappa^3 L^3} \right) (E_A - E_S) = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{m\kappa L^3} e^{-\kappa\Delta} \quad (\text{B.56})$$

Sachant que $\kappa L \gg \pi$, on en déduit

$$E_A - E_S \approx \frac{4\pi^2 \hbar^2}{m\kappa L^3} e^{-\kappa\Delta}, \quad (\text{B.57})$$

ce qui nous permet bien de retrouver l'éq. 6.41 admise en 6.4.4. Finalement, tout se passe comme si on avait directement remplacé $\kappa_{\pm}$ par κ dans l'éq. B.49. En divisant le résultat obtenu par $\hbar^2/(2m)$, on obtient

$$k_-^2 - k_+^2 \approx \frac{8\pi^2}{\kappa L^3} e^{-\kappa\Delta}, \quad (\text{B.58})$$

soit

$$\frac{\delta\kappa}{\kappa} \approx \frac{2\pi^2}{\kappa^3 L^3} e^{-\kappa\Delta} \ll 1, \quad (\text{B.59})$$

car $\kappa\Delta \gg 1$ et $\kappa L \gg 1$. On a de plus

$$\delta\kappa\Delta \approx \frac{2\pi^2}{\kappa^3 L^3} \kappa\Delta e^{-\kappa\Delta} \leq \frac{2\pi^2}{e\kappa^3 L^3} \ll 1, \quad (\text{B.60})$$

sachant que la fonction qui à x associe xe^{-x} est majorée par $1/e$. On vérifie ainsi *a posteriori* les hypothèses $\delta\kappa/\kappa \ll 1$ et $\delta\kappa\Delta \ll 1$ ayant permis le développement limité au premier ordre effectué plus haut.

B.5 Démonstration de l'inégalité de Bell

L'objet de cette annexe est de déterminer les contraintes imposées au paramètre de Bell S dans le cadre d'une théorie à variables cachées locales [1, 29, 30]. On rappelle que S , défini par l'éq. 7.42, s'écrit $S = E(\alpha, \beta) + E(\alpha, \beta') + E(\alpha', \beta') - E(\alpha', \beta)$, où $E(\alpha, \beta) = \langle AB \rangle$ est la fonction de corrélation entre les mesures effectuées par Alice et Bob, comme exposé en 7.3. Les grandeurs A et B peuvent prendre les valeurs ± 1 de manière équiprobables. Dans le cadre d'une théorie à variables cachées, on suppose que les valeurs de A et B sont en fait parfaitement déterminées pour chaque paire de photons. On appelle donc $A(\lambda, \alpha)$ et $B(\lambda, \beta)$ les valeurs de ces grandeurs en fonction d'un paramètre $\lambda \in \Lambda$. On peut alors écrire

$$S = \int_{\lambda \in \Lambda} (A(\lambda, \alpha)B(\lambda, \beta) + A(\lambda, \alpha)B(\lambda, \beta') + A(\lambda, \alpha')B(\lambda, \beta') - A(\lambda, \alpha')B(\lambda, \beta)) \mathcal{P}(\lambda) d\lambda. \quad (\text{B.61})$$

En regroupant les termes de manière astucieuse, on peut encore écrire

$$S = \int_{\lambda \in \Lambda} (A(\lambda, \alpha)(B(\lambda, \beta) + B(\lambda, \beta')) + A(\lambda, \alpha')(B(\lambda, \beta') - B(\lambda, \beta))) \mathcal{P}(\lambda) d\lambda. \quad (\text{B.62})$$

Dans l'expression ci-dessus, on peut remarquer que, pour une valeur donnée de λ , la somme $B(\lambda, \beta) + B(\lambda, \beta')$ peut prendre soit la valeur 0 (lorsque $B(\lambda, \beta)$ et $B(\lambda, \beta')$ sont opposés), soit l'une des valeurs $+2$ ou -2 (lorsque $B(\lambda, \beta)$ et $B(\lambda, \beta')$ sont identiques). Dans le second cas, la grandeur $B(\lambda, \beta') - B(\lambda, \beta)$ sera alors nulle. Ainsi, on voit que dans l'intégrale donnée par l'éq. B.62, l'un des deux termes sera toujours égal à zéro, tandis que l'autre sera alors égal à ± 2 . La somme de ces deux termes sera donc toujours égale ± 2 . La grandeur S étant la moyenne pondérée par $\mathcal{P}(\lambda)$ d'une grandeur pouvant prendre les valeurs $+2$ ou -2 , sa valeur absolue sera toujours inférieure ou égale à 2. On obtient ainsi l'inégalité de Bell

$$|S| \leq 2. \quad (\text{B.63})$$

B.6 Optimisation du paramètre de Bell

Cherchons à déterminer les angles α , β , α' et β' qui maximisent le paramètre de Bell S défini par l'éq. 7.42, dont on rappelle ici l'expression :

$$S = E(\alpha, \beta) + E(\alpha, \beta') + E(\alpha', \beta') - E(\alpha', \beta) \quad (\text{B.64})$$

avec, selon la physique quantique, $E(\alpha, \beta) = \cos 2(\alpha - \beta)$. Pour trouver les extréma du paramètre S , il suffit d'annuler ses dérivées partielles par rapport aux 4 angles dont il dépend, ce qui nous

donne

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = \frac{\partial E(\alpha, \beta)}{\partial \alpha} + \frac{\partial E(\alpha, \beta')}{\partial \alpha} = -2 \sin 2(\alpha - \beta) - 2 \sin 2(\alpha - \beta') = 0 \quad (\text{B.65})$$

$$\frac{\partial S}{\partial \beta} = \frac{\partial E(\alpha, \beta)}{\partial \beta} - \frac{\partial E(\alpha', \beta)}{\partial \beta} = 2 \sin 2(\alpha - \beta) - 2 \sin 2(\alpha' - \beta) = 0 \quad (\text{B.66})$$

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha'} = \frac{\partial E(\alpha', \beta')}{\partial \alpha'} - \frac{\partial E(\alpha', \beta)}{\partial \alpha'} = -2 \sin 2(\alpha' - \beta') + 2 \sin 2(\alpha' - \beta) = 0 \quad (\text{B.67})$$

$$\frac{\partial S}{\partial \beta'} = \frac{\partial E(\alpha, \beta')}{\partial \beta'} + \frac{\partial E(\alpha', \beta')}{\partial \beta'} = 2 \sin 2(\alpha - \beta') + 2 \sin 2(\alpha' - \beta') = 0 \quad (\text{B.68})$$

ce qui peut encore s'écrire

$$\sin 2(\alpha - \beta) = \sin 2(\beta' - \alpha) = \sin 2(\alpha' - \beta') = \sin 2(\alpha' - \beta). \quad (\text{B.69})$$

La première égalité correspond à l'éq. B.65, la seconde à l'éq. B.68, la troisième à l'éq. B.67. Enfin, l'éq. B.66 – redondante – nous redonne l'égalité entre le premier et le dernier membre des égalités ci-dessus. Ainsi, S prendra une valeur extrême si et seulement si les différences d'angles $\alpha - \beta$, $\beta' - \alpha$, $\alpha' - \beta'$ et $\alpha' - \beta$ sont soit identiques, soit symétriques de part et d'autre de $\pi/4$. Lorsque ces différences d'angles sont identiques, il en va de même pour les fonctions de corrélation correspondantes. À l'inverse, lorsque ces différences d'angles sont symétriques de part et d'autre de $\pi/4$, alors les angles doubles sont symétriques par rapport à $\pi/2$. Comme ce sont ces angles doubles qui interviennent dans le cosinus apparaissant dans les fonctions de corrélation, ces dernières seront alors opposées. Compte tenu des signes figurant devant les fonctions de corrélation dans le paramètre S , on en déduit que la valeur maximale sera obtenue pour $\alpha - \beta = \beta' - \alpha = \alpha' - \beta' = \theta$ et $\alpha' - \beta = \pi/2 - \theta$, où θ est un angle que l'on peut déterminer en écrivant

$$3\theta = (\alpha - \beta) + (\beta' - \alpha) + (\alpha' - \beta') = \alpha' - \beta = \frac{\pi}{2} - \theta, \quad (\text{B.70})$$

d'où l'on déduit $\theta = \pi/8$ et

$$S = \cos 2\theta + \cos 2\theta + \cos 2\theta - \cos 2(\pi/2 - \theta) = 4 \cos 2\theta = 4 \cos \frac{\pi}{4} = 2\sqrt{2}. \quad (\text{B.71})$$

On retrouve donc exactement les angles choisis en 7.3 et représentés Fig. 7.5, ainsi bien entendu que la valeur de S correspondante.

Bibliographie

- [1] J.-L. BASDEVANT et J. DALIBARD, *Mécanique Quantique*, Editions de l'Ecole Polytechnique, 2001.
- [2] M. LE BELLAC, *Physique quantique*, EDP Sciences, CNRS Éditions, 2013.
- [3] A. I. LVOVSKY, *Quantum physics, an introduction based on photons*, Springer, 2018.
- [4] E. AZAR, P. BURDEAU, A. LÉVY, P. RICHARD, et A. SARFATI, *Rapport de PSC : Laboratoire en ligne de physique quantique*, Ecole Polytechnique, 2019.
- [5] G. BILLIET, M. BOULANGER, C. MIRAS, L. PAGOT, et X.-D. TRINH, *Rapport de PSC : Laboratoire en ligne de physique quantique*, Ecole Polytechnique, 2020.
- [6] A. HUYGHUES-DESPOINTES, P. GARELLI, J. DE GARIDEL THORON, J.-B. MOUSSA, et J. R. DE BÉZIEUX, *Rapport de PSC : Laboratoire en ligne de physique quantique*, Ecole Polytechnique, 2021.
- [7] G. BEN SLAMA, V. CHABIRAND, C. GUIMARD, L. KAM KON SENG, et A. RODRIGUES, *Rapport de PSC : Inégalités de Bell*, Ecole Polytechnique, 2023.
- [8] M. AIT EL BERKAOU, S. BILLAULT, J. BLOCH, V. HARFF, I. MAGHRAOUI, et C. VOREITER, *Rapport de PSC : Expérimentation des inégalités de Bell*, Ecole Polytechnique, 2024.
- [9] C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU, et F. LALOË, *Mécanique quantique*, Hermann, Paris, 1973.
- [10] M. JOFFRE, *Physique quantique avancée*, Ecole polytechnique, 2025, www.quantum-physics.polytechnique.fr/phy41030.pdf.
- [11] E. GOULIELMAKIS, M. UIBERACKER, R. KIENBERGER, A. BALTUSKA, V. YAKOVLEV, A. SCRINZI, T. WESTERWALBESLOH, U. KLEINEBERG, U. HEINZMANN, M. DRESCHER, et F. KRAUSZ, Direct measurement of light waves, *Science* **305**, 1267 (2004).
- [12] C. DAVISSON et L. GERMER, Reflection of electrons by a crystal of nickel, *Proc. Nat. Acad. Sc.* **14**, 317 (1928).
- [13] G. THOMSON, Experiments on the diffraction of cathode rays, *Proc. Roy. Soc. Lond.* **117**, 600 (1928).
- [14] A. TONOMURA, J. ENDO, T. MATSUDA, T. KAWASAKI, et H. EZAWA, Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern, *Am. J. Phys.* **57**, 117 (1989).
- [15] P. GRANGIER, G. ROGER, et A. ASPECT, Experimental-evidence for a photon anticorrelation effect on a beam splitter - a new light on single-photon interferences, *EPL* **1**, 173 (1986).

- [16] A. ASPECT et P. GRANGIER, *Quantum Photonics : Pioneering Advances and Emerging Applications*, The first single photon sources and single photon interference experiments, pp. 3–23, Springer Series in Optical Sciences, 2019.
- [17] A. ASPECT et P. GRANGIER, *Optique quantique 2 : Photons et atomes (PHY562)*, Ecole Polytechnique, 2016.
- [18] J. COOLEY et J. TUKEY, An algorithm for machine calculation of complex fourier series, *Math. Comput.* **19**, 297 (1965).
- [19] M. MORICONI, Nodes of wavefunctions, *Am. J. Phys.* **75**, 284 (2007).
- [20] G. BINNIG et H. ROHRER, Scanning tunneling microscopy - from birth to adolescence, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 615 (1987).
- [21] J.-L. BASDEVANT, *Henri Becquerel à l'aube du XX^e siècle : 1896-1996, centenaire de la découverte de la radioactivité*, Editions de l'Ecole Polytechnique, 1996, BCX 530.2 BAS.HEN.
- [22] M. SKLODOWSKA-CURIE, Rayons émis par les composés de l'uranium et du thorium, *C. R. Acad. Sc.* **126**, 1101 (1898), https://www.academie-sciences.fr/pdf/dossiers/Curie/Curie_pdf/CR1898_p1101.pdf.
- [23] P. CURIE et M. S-CURIE, Sur une substance nouvelle radioactive, contenue dans la pechblende, *C. R. Acad. Sc.* **127**, 175 (1898), https://www.academie-sciences.fr/pdf/dossiers/Curie/Curie_pdf/CR1898_p175_178.pdf.
- [24] P. CURIE, M. CURIE, et G. BÉMONT, Sur une nouvelle substance fortement radioactive contenue dans la pechblende, *C. R. Acad. Sc.* **127**, 1215 (1898), https://www.academie-sciences.fr/pdf/dossiers/Curie/Curie_pdf/CR1898_p1215_1217.pdf.
- [25] G. GAMOW, On the Quantum theory of atomic nucleus, *Zeit. Phys.* **51**, 204 (1928).
- [26] R. GURNEY et E. CONDON, Wave mechanics and radioactive disintegration, *Nature* **122**, 439 (1928).
- [27] A. EINSTEIN, B. PODOLSKY, et N. ROSEN, Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?, *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935).
- [28] N. BOHR, Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?, *Phys. Rev.* **48**, 696 (1935).
- [29] J. BELL, On problem of hidden variables in quantum mechanics, *Rev. Mod. Phys.* **38**, 447 (1966).
- [30] J. CLAUSER, M. HORNE, A. SHIMONY, et R. HOLT, Proposed experiment to test local hidden-variable theories, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 880 (1969).
- [31] S. FREEDMAN et J. CLAUSER, Experimental test of local hidden-variable theories, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 938 (1972).
- [32] A. ASPECT, P. GRANGIER, et G. ROGER, Experimental realization of einstein-podolsky-rosen-bohm gedankenexperiment - a new violation of bell inequalities, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 91 (1982).
- [33] A. ASPECT, J. DALIBARD, et G. ROGER, Experimental test of bell inequalities using time-varying analyzers, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1804 (1982).

- [34] G. WEIHS, T. JENNEWEIN, C. SIMON, H. WEINFURTER, et A. ZEILINGER, Violation of Bell's inequality under strict Einstein locality conditions, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5039 (1998).
- [35] Scientific background on the Nobel prize in physics 2022, (2022), www.nobelprize.org/uploads/2023/10/advanced-physicsprize2022-4.pdf.
- [36] P. KWIAT, E. WAKS, A. WHITE, I. APPELBAUM, et P. EBERHARD, Ultrabright source of polarization-entangled photons, *Phys. Rev. A* **60**, R773 (1999).
- [37] M. JOFFRE, *Optique non-linéaire en régimes continu et femtoseconde*, Master Concepts fondamentaux de la Physique, Ecole Normale Supérieure, Ecole Polytechnique, Universités Paris VI et Paris XI, 2008, hal.archives-ouvertes.fr/cel-00092964v2.
- [38] A. ASPECT, *Si Einstein avait su*, Editions Odile Jacob, 2025.
- [39] G. E. UHLENBECK et S. GOUDSMIT, *Naturwiss.* **13**, 953 (1925).
- [40] S. GOUDSMIT, La découverte du spin de l'électron, *J. Phys.* **28**, 123 (1967), hal.science/jpa-00206480.
- [41] W. GERLACH et O. STERN, Experimental evidence for space quantisation in a magnetic field, 1922.
- [42] B. FRIEDRICH et D. HERSCHBACH, Stern and Gerlach : How a bad cigar helped reorient atomic physics, *Physics Today* **56**, 53 (2003).
- [43] T. PHIPPS et J. TAYLOR, The magnetic moment of the hydrogen atom, *Phys. Rev.* **29**, 0309 (1927).
- [44] R. FRASER, The effective cross section of the oriented hydrogen atom, *Proc. Roy. Soc. Lond.* **114**, 212 (1927).
- [45] D. RENARD, *Calcul différentiel et fonctions holomorphes (FMA41031EP)*, Ecole polytechnique, 2025.
- [46] F. GOLSE, *Distributions, analyse de Fourier et équations aux dérivées partielles (FMA42032EP)*, Ecole polytechnique, 2025.
- [47] F. BRETENAKER et A. BROWAEYS, *Ondes électromagnétiques (PHY42032EP)*, Ecole polytechnique, 2025.

Index

- Adjoint, 47
- Ammoniac, 120
- Anticommutateur, 89
- Aspect, 19, 140
- Base
 - continue, 66
 - dénombrable, 42
- Becquerel, 116
- Bell, 130, 139
- Bloch, 159
- Bohr, 130
- Boltzmann, 171
- Clauser, 140
- Commutateur, 61
- Constante
 - de Boltzmann, 17
 - de Planck, 17
 - de Planck réduite, 17
- Corps noir, 16
- Cube séparateur de polarisation, 26
- Curie, 116
- d'Alembert, 12, 183
- Dalibard, 140
- Davisson, 18
- de Broglie, 17
- Degrés de liberté, 132
- Diffraction, 187
- Dipôle magnétique, 144
- Dirac
 - Distribution de, 69, 176
 - Formalisme de, 41
 - Méthode de, 124
- Dualité onde-corpuscule, 11
- Dégénérescence, 46
- ECOC, 63
- Effet
 - de serre, 17
 - tunnel, 114
- Einstein, 16, 17, 129, 139
- Energie
 - cinétique, 12
 - potentielle, 12
- EPR, 129, 139
- Equation
 - de d'Alembert, 12
 - de Hamilton-Jacobi, 12
 - de Helmholtz, 13
 - de la chaleur, 93
 - de Maxwell, 183
 - de Schrödinger, 58
 - de Schrödinger indépendante du temps, 59
- Etat
 - anti-liant, 120
 - d'un système, 11
 - de diffusion, 110
 - factorisable, 131
 - factorisé, 130
 - intriqué, 131
 - liant, 120
 - lié, 108
 - stationnaire, 60
- Expérience

- d'Aspect, 140
- de Davisson et Germer, 18
- de Stern et Gerlach, 147
- des fentes d'Young, 14
- Fonction d'onde, 67
- Force
 - de Lorentz, 143
- Fourier, 73, 83, 93
- Fraunhofer, 186
- Fresnel, 11, 186
- Fréquence, 13
 - angulaire, 13
 - de Larmor, 146
 - de Rabi, 166
- Gerlach, 147
- Germer, 18
- Grangier, 19, 140
- Génération paramétrique, 133
- Hamilton, 12
- Hamiltonien, 56
- Heisenberg, 88
- Helmholtz, 13, 99
- Hermite, 126, 127
- Hertz, 13
- Huyghens, 186
- Impulsion, 11, 70
- Interférences, 14, 19, 27
- Intrication, 129, 131
- Inégalité
 - de Bell, 140
 - de Cauchy Schwartz, 88
 - de Heisenberg, 88
- Jacobi, 12
- Ket, 41
- Lame
 - demi-onde, 28
 - quart d'onde, 28
 - semi-transparente, 19
 - à retard, 28
- Laplacien, 13
- Larmor, 162
- Longueur d'onde, 13
- Lorentz, 143
- Malus, 25
- Matrices de Pauli, 151
- Maxwell, 16, 183
- Mesure, 49
- Microscope à effet tunnel, 115
- Moment cinétique orbital, 148
- Moment magnétique, 144
- Moment magnétique de spin, 162
- Méthode
 - de Dirac, 124
- Newton, 11, 12
- Observable, 51, 53
- Onde, 12
 - monochromatique, 13
 - plane monochromatique, 13
 - évanescence, 112
- Optique
 - non-linéaire, 133
 - quantique, 23
- Opérateur
 - annihilation, 123
 - anti-hermitien, 89
 - auto-adjoint, 47
 - création, 123
 - d'évolution, 55
 - hermitien, 47
- Oscillateur harmonique, 121
- Oscillations
 - de Rabi, 167
- Paquet d'ondes minimal, 92
- Parseval, 85
- Pauli, 143, 151
- Photons, 11, 17
- Plancherel, 85
- Planck, 17

- Podolsky, 129, 139
- Polarisation
 - circulaire, 24
 - linéaire, 24
 - transverse, 24
- Polariseur
 - à deux voies, 25
 - à une voie, 25
- Position, 65
- Postulat
 - de la mesure, 51, 53
- Potentiel, 12
- Prisme de Rochon, 25
- Produit tensoriel, 130
- Projecteur, 52
- Propagation
 - d'un paquet d'ondes, 93
 - d'une onde électromagnétique, 12
- Précession de Larmor, 162
- Puits
 - de potentiel, 107
 - infini, 77
 - quantique, 106
- Pulsation, 13
- Période, 13
- Rabi, 159, 166
- Radioactivité, 116
- Rapport gyromagnétique, 145, 162
- Relation de fermeture, 46
- RMN, 159
- Rochon, 25
- Roger, 140
- Rosen, 129, 139
- Résonance Magnétique Nucléaire, 159
- Skłodowska, 116
- Spectre, 46
- Sphère
 - de Bloch, 159
 - de Poincaré, 161
- Spin, 143
- Stern, 147
- Système
 - composite, 130
 - isolé, 57
- Temps de vol, 97
- Théorème
 - d'Ehrenfest, 63, 163
 - de Bell, 139
 - de Parseval-Plancherel, 85
 - spectral, 48
- Transformée de Fourier, 73, 83
- Vecteur d'onde, 13
- Young, 11, 14, 99
- Zeilinger, 140