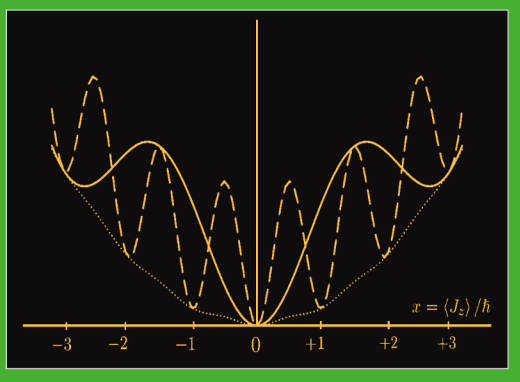


MÉCANIQUE QUANTIQUE – TOME III ●

FERMIONS, BOSONS, PHOTONS,
CORRÉLATIONS ET INTRICATION



●
CLAUDE COHEN-TANNOUJJI
BERNARD DIU
FRANCK LALOË

Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu
et Franck Lalö

Mécanique quantique

Tome III

*Fermions, bosons, photons,
corrélations et intrication*

SAVOIRS ACTUELS

EDP Sciences/CNRS ÉDITIONS

Dans la même collection :

Cohomologie galoisienne - Et théorie du corps de classes

David Harari

Optique non linéaire

François Hache

Chimie verte - Concepts et applications

Jacques Augé et Marie-Christine Scherrmann

*De la solution à l'oxyde - Chimie aqueuse des cations métalliques,
Synthèse de nanostructures*

Jean-Pierre Jolivet

Physique de la conversion d'énergie

Jean-Marcel Rax

La matière en désordre

Étienne Guyon, Jean-Pierre Hulin et Daniel Bideau

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

Ouvrage publié avec le soutien du laboratoire Kastler Brossel.

Imprimé en France

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

et

CNRS Éditions, 15, rue Malebranche, 75005 Paris.

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

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

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

Table des matières

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

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

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

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

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

XXI	Intrication quantique, mesures, inégalités de Bell	623
A	Notion d'intrication, buts de ce chapitre	624
B	Etats intriqués d'un système de deux spins 1/2	626
C	Intrication entre systèmes physiques quelconques	629
D	Mesure idéale et états intriqués	632
E	Expériences "quel chemin" : peut-on identifier le chemin suivi par le photon dans l'expérience des fentes d'Young ? .	639
F	Intrication, non-localité, théorème de Bell	641

Compléments du chapitre XXI

GUIDE DE LECTURE	651
-------------------------	------------

A_{XXI}	Opérateur densité et corrélations ; séparabilité	653
1	Entropie statistique de von Neumann	653
2	Différences entre corrélations classiques et quantiques . . .	656
3	Séparabilité	659

B_{XXI}	Etats GHZ, échange d'intrication	663
1	Désaccord de signe dans un état GHZ	663
2	Échange d'intrication	668

C_{XXI}	Emergence d'une phase relative sous l'effet de processus de détection	673
1	Probabilités des mesures de position simple, double, etc. .	674
2	Augmentation de l'intrication sous l'effet du processus de détection	679
3	Détection d'un grand nombre de particules Q	681

D_{XXI}	Emergence d'une phase relative sur des condensats à spin, argument EPR et non-localité macroscopiques	689
1	Deux condensats à spin	690
2	Probabilités des différents résultats de mesure	692
3	Discussion	696

APPENDICES	703
-------------------	------------

IV	Intégrale de chemins de Feynman	703
1	Propagateur quantique d'une particule	704
2	Interprétation en termes d'histoires classiques	708
3	Discussion ; une nouvelle règle de quantification	710
4	Opérateurs	712

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

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

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

Avant-propos des éditeurs scientifiques

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Avant-propos des auteurs au Tome III

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Chapitre XV

Opérateurs de création et d'annihilation pour des particules identiques

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

Introduction

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

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

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

A. Formalisme général

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

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

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

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

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

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

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

et :

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

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

A-1. Etats et espace de Fock

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

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

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

Remarque :

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

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

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

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

- Suppression du recul, 468, 469
 Surface de Fermi modifiée, 341

 Tamasic (composante de la transformée de Wigner), 762
 Taux de photo-ionisation, 547, 557
 Température Doppler, 461
 Terme d'appariement, 303
 Terme direct et d'échange, 24, 44, 46, 61, 64
 Théorème de Bell, 641, 645
 Théorème de Wick, 223, 227
 Tore (écoulement dans un), 83
 Transformation de Bogolubov, 379
 Transformation de Bogolubov-Valatin, 261, 346
 Transformation de jauge, 388
 Transformée de Wigner, 735
 Transition virtuelle, 533
 Transitions à deux photons, 529
 Transitions dipolaires électriques, 486
 Transverses (champs), 389
 Triplet de fluorescence, 577
 Trou d'échange, 196
 Trous, 33
 Trous (création et d'annihilation), 34
 Tunnel (ionisation), 559

 Une particule (opérateur à), 14, 17, 40, 176
 Unicité du résultat de mesure, 637

 Valeurs moyennes anormales, 253
 Variables continues (dans lagrangien), 413
 Variables intensives ou extensives, 729
 Variables normales du champ, 399
 Vide (état du), 6
 Vide d'excitations, 35
 Vide de photons, 435
 Vide de quasi-particules, 261
 Violations des inégalités de Bell, 646, 701
 Virtuelle (transition), 533
 Vitesse critique, 88
 Von Neumann (chaîne de), 637
 Von Neumann (entropie statistique), 653
 Von Neumann (mesure idéale), 632
 Von Neumann (postulat de réduction), 638
 Vortex dans un superfluide, 83

 Weyl (opérateur de), 738
 Wick (théorème de), 223, 227
 Wigner (transformée de), 735

MÉCANIQUE QUANTIQUE III

CLAUDE COHEN-TANNOUJJI
BERNARD DIU
FRANCK LALOË

Cet ouvrage fait suite aux deux premiers volumes *Mécanique quantique - Tomes I et II* (publication aux Éditions Hermann, première édition en 1973).

Ce troisième tome de mécanique quantique se place dans la même optique que les précédents tomes, avec une rédaction où toutes les étapes des raisonnements sont explicitées et les calculs détaillés. Chaque chapitre est suivi d'une série de compléments destinés à appliquer à un certain nombre d'exemples intéressants les connaissances acquises. L'ouvrage s'adresse à des physiciens ou des chimistes déjà familiers avec les principes de base de la mécanique quantique.

La première partie de l'ouvrage concerne l'étude des ensembles de particules identiques, le formalisme des opérateurs de création et d'annihilation, des opérateurs champ, etc. De nombreux exemples sont traités dans les compléments, en particulier les méthodes de champ moyen (équations de Hartree-Fock pour des fermions, de Gross-Pitaevskii pour des bosons). L'appariement en mécanique quantique est introduit en traitant dans un même cadre général fermions (théorie « BCS », pour Bardeen-Cooper-Schrieffer) et bosons (théorie de Bogolubov). La seconde partie concerne la théorie quantique du champ électromagnétique : émission spontanée, transitions à plusieurs photons, atome habillé, etc. avec des perspectives sur des méthodes expérimentales comme le pompage optique et le refroidissement et le piégeage d'atomes par des faisceaux laser. Un dernier chapitre traite de l'intrication quantique, de l'argument d'Einstein, Podolsky et Rosen ainsi que du théorème de Bell, insistant ici aussi sur l'importance des corrélations.

Claude Cohen-Tannoudji a été chercheur CNRS, puis professeur successivement à l'Université de Paris et au Collège de France, donnant des cours dont l'influence scientifique a été considérable. Il a été lauréat du Prix Nobel en 1997, avec Steve Chu et Williams Phillips, pour ses nombreuses contributions à la recherche, en particulier dans le domaine du refroidissement et du piégeage d'atomes par des faisceaux laser.

Bernard Diu a été professeur à l'Université de Paris et y a enseigné divers domaines de la physique, en particulier la mécanique quantique et la physique statistique, sur laquelle il a écrit un ouvrage de référence avec trois co-auteurs. Il a toujours montré un intérêt soutenu pour l'enseignement et la diffusion des sciences. Son domaine de recherche principal est la physique des particules.

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

Série Physique dirigée par Michèle LEDUC et Michel LE BELLAC

SAVOIRS ACTUELS

Collection dirigée par Michèle LEDUC

CNRS ÉDITIONS

www.cnrseditions.fr



edpsciences
www.edpsciences.org

Création graphique : Béatrice Couédel



55 €

ISBN EDP Sciences 978-2-7598-2107-5
ISBN CNRS ÉDITIONS 978-2-271-11808-0

Ces ouvrages, écrits par des chercheurs, reflètent des enseignements dispensés dans le cadre de la formation à la recherche. Ils s'adressent donc aux étudiants avancés, aux chercheurs désireux de perfectionner leurs connaissances ainsi qu'à tout lecteur passionné par la science contemporaine.