



HAL
open science

Mécanique quantique : seconde quantification et résolvante

Yvan Castin

► **To cite this version:**

Yvan Castin. Mécanique quantique : seconde quantification et résolvante. Master. Mécanique quantique avancée au Master 2 “ Concepts fondamentaux de la physique ” parcours “ Physique quantique ”, ENS Ulm, Paris, France. 2011, 100 p. hal-04943729

HAL Id: hal-04943729

<https://cel.hal.science/hal-04943729v1>

Submitted on 12 Feb 2025

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial - NoDerivatives 4.0
International License

**Master 2 de l'ENS Ulm : Concepts fondamentaux de la
physique**

Parcours : Physique quantique

Année 2011–2012

**Mécanique quantique : seconde
quantification et résolvente**

**Yvan Castin
LKB-ENS (Paris)
yvan.castin@lkb.ens.fr**

Avertissement

Les changements apportés au polycopié original sont essentiellement une mise en conformité avec les usages du français scientifique, aussi bien au niveau de la langue (l'hamiltonien plutôt que le Hamiltonien, gaz de bosons plutôt que gaz de Bose, intégrale curviligne plutôt qu'intégrale de chemin, Pitayevski plutôt que Pitaevskii, etc.) que de la typographie (vecteur position \mathbf{r} et vecteur d'onde \mathbf{k} notés en gras, élément d'intégration noté dx , nombre imaginaire i et nombre d'Euler e écrits en romain, guillemets français « ... », etc.).

Par ailleurs, les notes ont été mises en bas de page plutôt que dans les références bibliographiques, les fonctionnalités d'hypertexte ont été activées (sont désormais cliquables les numéros d'équations, les titres des sections et sous-sections dans la table des matières, les titres de la plupart des références bibliographiques, etc.) et le passage aux fontes Fourier-GUTenberg 11 points a réduit le nombre total de pages sans compromettre la lisibilité.

Enfin, une relecture de l'ensemble a permis d'éliminer quelques fautes de frappe, erreurs, omissions, imprécisions, maladroites de style et autres imperfections, dont certaines m'ont été signalées par Alice Sinatra, ici remerciée.

Paris, février 2025

Yvan Castin

Table des matières

1	Particules indiscernables	1
1.1	Nécessité d'un postulat de symétrisation	1
1.2	Le postulat de symétrisation	1
1.3	Construction d'une base de vecteurs d'état	3
1.3.1	Normalisation des états fermioniques	4
1.3.2	Normalisation des états bosoniques	5
1.3.3	Application des projecteurs A et S à l'équilibre thermodynamique	5
1.4	Retour sur le cas de deux particules	6
2	Le formalisme de la seconde quantification	7
2.1	Opérateurs de création et d'annihilation	7
2.1.1	Définition	7
2.1.2	Action des a et a^+ dans la base des états	9
2.1.3	Relations de commutation et d'anticommutation	11
2.1.4	L'opérateur de champ	12
2.2	Expression des observables en seconde quantification	13

2.2.1	Observables à un corps	13
2.2.2	Observables à deux corps	14
2.3	Évolution de l'opérateur de champ pour un hamiltonien typique	15
2.3.1	Un hamiltonien typique	15
2.3.2	Équations du mouvement pour l'opérateur de champ	17
3	Applications de la seconde quantification	19
3.1	Le théorème de Wick	19
3.1.1	Le problème physique considéré	19
3.1.2	Première étape dans la résolution	20
3.1.3	Fin de la résolution pour les bosons	22
3.1.4	Fin de la résolution pour les fermions	23
3.1.5	Un exemple d'application du théorème de Wick	24
3.2	Diagonalisation d'hamiltoniens quadratiques	27
3.2.1	Motivation et objectif	27
3.2.2	Cas des fermions	28
3.2.3	Cas des bosons	32
3.3	Méthode de Bogolioubov	39
3.3.1	Régime considéré et hamiltonien modèle	39
3.3.2	Idée générale de la méthode de Bogolioubov	40
3.3.3	Développement à l'ordre zéro : l'équation de Gross-Pitayevski	41
3.3.4	Développement à l'ordre un	42
3.3.5	Développement à l'ordre deux	43
3.3.6	Élimination du mode du condensat et résultat final	44
3.3.7	Approche de Bogolioubov avec brisure de symétrie $U(1)$	46
3.3.8	Applications de la méthode de Bogolioubov	50
3.3.9	Régularisation de la théorie de Bogolioubov en dimension trois	53
4	La résolvante	56
4.1	Position du problème	56
4.2	Rappel du formalisme élémentaire : calcul perturbatif de l'opérateur d'évolution	57
4.3	La résolvante de l'hamiltonien	58
4.3.1	Propriétés analytiques de $G(z)$	58
4.3.2	Lien de la résolvante avec l'opérateur d'évolution	60
4.3.3	Développement perturbatif de $G(z)$	64
4.4	La méthode des projecteurs	66
4.4.1	Équation fondamentale sur $PG(z)P$	66
4.4.2	Ébauche de lien avec l'approche diagrammatique à N corps	68
4.4.3	Cas d'un spectre purement discret	69

4.4.4	Un état discret couplé à un continuum	70
4.4.5	Un modèle exactement soluble	73
4.5	Théorie de la diffusion	74
4.5.1	Solution formelle du problème de diffusion	76
4.5.2	Limite de basse énergie	79
4.5.3	États liés et pôles de l'amplitude de diffusion	81
4.5.4	Matrice S , théorème optique et relation de fermeture	81
5	L'équation pilote	84
5.1	Obtention dans l'approximation de Born-Markov	85
5.2	Étude dans la base propre de H_S	87
5.2.1	Comparaison de H_{eff} avec le formalisme $PG(z)P$	87
5.2.2	Équation pilote dans l'approximation séculaire	88
5.3	La forme de Lindblad	90
5.4	Les fonctions d'onde Monte-Carlo	92
5.5	Le théorème de régression quantique	94
5.6	Point de vue de Heisenberg stochastique	94
6	Bibliographie	95
7	Références	96

1 Particules indiscernables

L'objectif est la description quantique de l'état d'une assemblée de N particules indiscernables non relativistes. Le cas $N = 1$ est supposé acquis.

1.1 Nécessité d'un postulat de symétrisation

Si les particules sont discernables grâce à l'un de leurs paramètres physiques (masse, spin, charge, ...), on les numérote d'une façon arbitraire mais objectivement descriptible à un autre observateur (par exemple, la particule 1 est la plus légère). Prenons l'exemple de deux particules de spin 1/2 de masses différentes. Pour un choix donné de numérotation, les vecteurs $|+\rangle \otimes |-\rangle$ et $|-\rangle \otimes |+\rangle$ représentent des états physiquement différents (+ et - sont les signes de la composante de spin selon l'axe de quantification).

La situation est différente dans le cas de particules indiscernables. Les vecteurs $|+\rangle \otimes |-\rangle$ et $|-\rangle \otimes |+\rangle$ représentent *a priori* le même état physique. En vertu du principe de superposition, $(|+\rangle \otimes |-\rangle \pm |-\rangle \otimes |+\rangle)/\sqrt{2}$ devraient représenter également le même état physique, alors qu'ils diffèrent par leur spin total!

1.2 Le postulat de symétrisation

L'idée sous-jacente est que les vecteurs d'état acceptables pour N particules indiscernables sont ceux invariants (à un facteur de phase près) par une renumérotation, c'est-à-dire une permutation, arbitraire des N particules.

Postulat. N particules indiscernables sont soit des bosons, soit des fermions. Le vecteur d'état des bosons est *totalelement symétrique* par échange des particules, c'est-à-dire invariant par toute permutation des N particules. Le vecteur d'état des fermions est *totalelement antisymétrique* par échange des particules, c'est-à-dire qu'il est invariant par toute permutation paire des N particules, et qu'il est changé en son opposé par toute permutation impaire.

Établissons le lien entre l'idée sous-jacente et le postulat. Par commodité, on introduit dans toute la suite de cette section 1 une base orthonormale $\{|u_\alpha\rangle\}$ de l'espace des états à une particule. Dans la suite, les u_α seront parfois appelés les *modes*. Par produit tensoriel des $|u_\alpha\rangle$, on construit une base de l'espace de Hilbert à N particules, non encore symétrisée. Cette base mathématique permet de définir simplement l'opérateur de permutation P_σ représentant dans l'espace de Hilbert la permutation σ de N objets :

$$P_\sigma |u_1\rangle \otimes \dots \otimes |u_N\rangle \equiv |u_{\sigma(1)}\rangle \otimes \dots \otimes |u_{\sigma(N)}\rangle \quad (1)$$

où $|u_1\rangle, \dots, |u_N\rangle$ sont N vecteurs quelconques de la base à une particule, dans une version simplifiée (que le lecteur nous pardonnera) de la notation plus orthodoxe $|u_{\alpha_1}\rangle, \dots, |u_{\alpha_N}\rangle$. Par linéarité, l'équation (1) définit complètement P_σ . On peut vérifier la règle de composition suivante

$$P_\sigma P_{\sigma'} = P_{\sigma' \circ \sigma} \quad (2)$$

pour deux permutations quelconques σ, σ' (noter l'inversion dans l'ordre de σ et σ' au second membre). On peut montrer que P_σ est unitaire :

$$P_\sigma^\dagger = P_{\sigma^{-1}} = P_\sigma^{-1}. \quad (3)$$

L'idée sous-jacente au postulat se formalise ainsi : un vecteur d'état donné $|\psi\rangle$ des N particules est acceptable ssi

$$\forall \sigma \in S_N \quad P_\sigma |\psi\rangle = \eta(\sigma) |\psi\rangle \quad (4)$$

où $\eta(\sigma)$ est un nombre complexe de module un fonction de la permutation considérée. Alors l'équation (2) impose $\eta(\sigma' \circ \sigma) = \eta(\sigma') \eta(\sigma)$. Décomposons σ en produit de transpositions :

$$\sigma = \tau_1 \circ \dots \circ \tau_k. \quad (5)$$

À l'aide de l'équation (2) on trouve que

$$\eta(\sigma) = \eta(\tau_1) \dots \eta(\tau_k). \quad (6)$$

Il reste à étudier $\eta(\tau_{ij})$ pour la transposition de deux éléments distincts i et j quelconques de $\{1, \dots, N\}$. Or on a

$$\tau_{ij} = \rho^{-1} \circ \tau_{12} \circ \rho \quad \text{où } \rho = \tau_{1i} \circ \tau_{2j} \quad (7)$$

si bien que

$$\eta(\tau_{ij}) = \eta(\rho^{-1}) \eta(\tau_{12}) \eta(\rho) = \eta(\tau_{12}). \quad (8)$$

Comme $\tau_{12} \circ \tau_{12} = 1$, $\eta(\tau_{12})^2 = 1$. Il y a donc bien deux cas à distinguer :

- $\eta(\tau_{12}) = 1$. Alors $\eta(\sigma) = 1$ pour toute permutation σ de N objets. C'est le cas des bosons.
- $\eta(\tau_{12}) = -1$. Alors $\eta(\sigma) = \epsilon(\sigma)$ où $\epsilon(\sigma)$ est la signature de la permutation σ . C'est le cas des fermions.

À méditer. Comment réconcilier le raisonnement précédent, complètement général, avec l'affirmation suivant laquelle peuvent exister en dimension deux des statistiques anyoniques (fractionnaires), ni bosoniques ni fermioniques? Une réponse simple possible : dans notre raisonnement, nous supposons que la fonction d'onde est monovaluée, alors qu'elle est multivaluée pour les anyons (présence d'une ligne de coupure dans le plan complexe pour la fonction d'onde du mouvement relatif de deux anyons).

Remarque. Compatibilité avec l'évolution temporelle. Le vecteur d'état en mécanique quantique évolue selon l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (9)$$

où H est l'opérateur hamiltonien du système de N particules. La compatibilité avec le postulat de symétrisation impose que

$$P_\sigma H(t) P_\sigma^{-1} = H \quad \forall \sigma \in S_N \quad (10)$$

c'est-à-dire que H doit commuter avec tous les P_σ .

1.3 Construction d'une base de vecteurs d'état

La base mathématique obtenue par tous les produits tensoriels possibles de N vecteurs de la base orthonormale à une particule $\{|u_\alpha\rangle\}$ doit être restreinte au sous-espace complètement symétrique ou complètement antisymétrique. Cette restriction est accomplie de façon élégante par l'action d'un projecteur, le *symétriseur* S ou l'*antisymétriseur* A :

$$S \equiv \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} P_\sigma \quad (11)$$

$$A \equiv \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \epsilon(\sigma) P_\sigma. \quad (12)$$

Voici quelques propriétés de A et de S :

- S et A sont hermitiens.
- S et A absorbent l'action d'un opérateur de permutation P_ρ , où ρ est une permutation quelconque, à un signe près dans le cas de A :

$$SP_\rho = P_\rho S = S \quad (13)$$

$$AP_\rho = P_\rho A = \epsilon(\rho)A. \quad (14)$$

- A et S sont des projecteurs :

$$S^2 = S \quad (15)$$

$$A^2 = A. \quad (16)$$

Comme ils sont hermitiens, ce sont donc des projecteurs orthogonaux. De plus, pour $N > 1$,

$$AS = SA = 0. \quad (17)$$

- S et A ne sont pas supplémentaires dès que $N > 2$:

$$S + A \neq 1 \text{ si } N > 2, \quad (18)$$

où 1 est l'opérateur identité. Notons que, lorsque $N = 2$, on a simplement

$$S = \frac{1}{2}(1 + P_{12}) \text{ pour 2 bosons} \quad (19)$$

$$A = \frac{1}{2}(1 - P_{12}) \text{ pour 2 fermions} \quad (20)$$

où l'on utilise la notation raccourcie habituelle $P_{12} = P_{\tau_{12}}$.

La construction d'une base des états obéissant au postulat de symétrisation s'effectue en appliquant S ou A au produit tensoriel de N vecteurs de base quelconques à une particule $|u_\alpha\rangle$. Chaque

vecteur de base à N corps ainsi produit est caractérisé par les nombres d'occupation n_α de chaque état à une particule, c'est-à-dire le nombre de fois que le vecteur $|u_\alpha\rangle$ apparaît dans le produit tensoriel.

Pour les bosons, les n_α peuvent varier de 0 à N . En revanche, pour les fermions, les nombres d'occupation doivent valoir 0 ou 1, sinon l'action de A donne un résultat nul. Supposons en effet que $|\psi\rangle$, produit tensoriel de N vecteurs à une particule, comporte au moins deux fois un même vecteur $|u_\alpha\rangle$, aux positions i et j dans le produit tensoriel, si bien que $|\psi\rangle$ est invariant par permutation des particules i et j :

$$P_{ij}|\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad (21)$$

Par action de A et utilisation de l'identité (14),

$$AP_{ij}|\psi\rangle = A|\psi\rangle \quad (22)$$

$$-A|\psi\rangle = A|\psi\rangle \quad (23)$$

on trouve alors que $A|\psi\rangle = 0$. Ce résultat est résumé par l'adage bien connu qu'on ne peut pas trouver deux fermions indiscernables dans le même état quantique (principe d'exclusion de Pauli).

1.3.1 Normalisation des états fermioniques

Considérons le vecteur non antisymétrisé

$$|\psi\rangle = |u_1\rangle \otimes \dots \otimes |u_N\rangle \quad (24)$$

où les $|u_j\rangle$, $1 \leq j \leq N$ sont N vecteurs de base à une particule quelconques mais deux à deux distincts. Calculons la norme au carré de $A|\psi\rangle$:

$$\langle \psi | A^\dagger A | \psi \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (25)$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in S_N} \epsilon(\sigma) \langle \psi | P_\sigma | \psi \rangle. \quad (26)$$

Comme les $|u_j\rangle$ distincts sont orthogonaux, seule la permutation identité a une contribution non nulle à la somme sur σ , et la norme au carré de $A|\psi\rangle$ vaut $1/N!$. D'où l'écriture finale du vecteur d'état totalement antisymétrisé :

$$||u_1, \dots, u_N\rangle \equiv \sqrt{N!} A |u_1\rangle \otimes \dots \otimes |u_N\rangle. \quad (27)$$

Notons bien que ce vecteur dépend de l'ordre des u_j . Par exemple $||u_2, u_1, \dots, u_N\rangle = -||u_1, \dots, u_N\rangle$. Pour terminer, faisons le lien avec la notion couramment utilisée de *déterminant de Slater*. En représentation position, le vecteur d'état est représenté par la fonction d'onde

$$\langle \mathbf{r}_1 | \otimes \dots \otimes \langle \mathbf{r}_N | ||u_1, \dots, u_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \langle \mathbf{r}_1 | u_1 \rangle & \dots & \langle \mathbf{r}_1 | u_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \mathbf{r}_N | u_1 \rangle & \dots & \langle \mathbf{r}_N | u_N \rangle \end{vmatrix} \quad (28)$$

où $|\dots|$ est le déterminant d'une matrice, ce qui permet un calcul numérique efficace de cette fonction d'onde, en $O(N^3)$ opérations.

1.3.2 Normalisation des états bosoniques

Considérons un état bosonique peuplant k états à une particule $|u_j\rangle$, $1 \leq j \leq k$ quelconques mais deux à deux distincts. Un choix commode du vecteur non symétrisé correspondant est

$$|\psi\rangle = |u_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes |u_2\rangle^{\otimes n_2} \otimes \dots \otimes |u_k\rangle^{\otimes n_k} \quad (29)$$

où les n_j sont les nombres d'occupation des états $|u_j\rangle$. Nous avons introduit la notation

$$|u\rangle^{\otimes n} \equiv |u\rangle \otimes \dots \otimes |u\rangle \quad (30)$$

avec n facteurs égaux à $|u\rangle$.

Calculons la norme au carré de $S|\psi\rangle$:

$$\langle \psi | S^\dagger S | \psi \rangle = \langle \psi | S^2 | \psi \rangle = \langle \psi | S | \psi \rangle \quad (31)$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in S_N} \langle \psi | P_\sigma | \psi \rangle. \quad (32)$$

Par orthogonalité de deux vecteurs de base à une particule distincts, les seules permutations σ donnant une contribution non nulle sont celles qui laissent globalement invariants les sous-ensembles $\{1, \dots, n_1\}$, $\{n_1 + 1, \dots, n_1 + n_2\}$, etc. Le nombre de telles permutations est $n_1! \times \dots \times n_k!$. Comme chacune de ces permutations donne une contribution unité à $\langle \psi | P_\sigma | \psi \rangle$, on trouve

$$\langle \psi | S^\dagger S | \psi \rangle = \frac{n_1! \dots n_k!}{N!}. \quad (33)$$

D'où l'écriture finale du vecteur d'état totalement symétrisé :

$$||n_1 : u_1, \dots, n_k : u_k\rangle \equiv \left(\frac{N!}{n_1! \dots n_k!} \right)^{1/2} S |u_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes |u_2\rangle^{\otimes n_2} \otimes \dots \otimes |u_k\rangle^{\otimes n_k}. \quad (34)$$

Notons bien que ce vecteur ne dépend pas de l'ordre des u_j . On peut écrire la fonction d'onde à N corps sur le modèle de (28) en divisant le préfacteur par le produit des $(n_j!)^{1/2}$ et en remplaçant le déterminant par un *permanent*.

1.3.3 Application des projecteurs A et S à l'équilibre thermodynamique

En physique statistique, on pose que l'opérateur densité d'un système à l'équilibre thermodynamique, dans l'ensemble canonique (nombre total N de particules fixé) est donné par

$$\rho^{\text{th}} = Z^{-1} e^{-\beta H} \quad (35)$$

où $\beta = 1/k_B T$, T étant la température, H est l'hamiltonien du système et Z est un facteur de normalisation, la fonction de partition. Dans le cas de N particules indiscernables, il faut compléter cette définition par un projecteur sur les états ayant la bonne symétrie, ce qui influe de manière cruciale sur les propriétés thermodynamiques :

$$\rho^{\text{th}} = Z_{\text{bosons}}^{-1} S e^{-\beta H} \quad \text{ou} \quad \rho^{\text{th}} = Z_{\text{fermions}}^{-1} A e^{-\beta H}. \quad (36)$$

1.4 Retour sur le cas de deux particules

Considérons d'abord le cas de deux particules indiscernables sans spin. Dans le cas des fermions, ceci peut être réalisé en pratique lorsque les fermions sont préparés dans une seule composante de spin, les autres composantes de spin qui lui sont orthogonales n'étant jamais peuplées : on dit que les fermions ont un *pseudo-spin* nul. Pour les bosons, il n'y a pas de conflit avec le théorème sur la statistique des spins. On choisit alors une base orthonormale $\{|\chi_\alpha\rangle\}$ de l'espace des états du mouvement d'une particule, dite base orbitale. Notre choix de vecteur de base orbital antisymétrique est simplement

$$|\text{orbital}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_1\rangle \otimes |\chi_2\rangle - |\chi_2\rangle \otimes |\chi_1\rangle) \quad (37)$$

où χ_1 et χ_2 sont deux vecteurs de base orbitaux quelconques mais distincts (donc orthogonaux). Notre choix de partie orbitale symétrique est

$$|\text{orbital}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_1\rangle \otimes |\chi_2\rangle + |\chi_2\rangle \otimes |\chi_1\rangle) \quad (38)$$

si deux modes différents sont peuplés, et

$$|\text{orbital}\rangle = |\chi_1\rangle \otimes |\chi_1\rangle \quad (39)$$

lorsqu'un même mode a une double occupation.

Exercice. Appliquer ceci au cas de deux particules dans une boîte cubique de côté L avec des conditions aux limites périodiques. On choisira pour les $|\chi_\alpha\rangle$ la base des ondes planes. Écrire la fonction d'onde à deux particules $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ correspondante. On imagine qu'on mesure la position des deux particules. Quelle est la densité de probabilité $|\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r})|^2$ de trouver les deux particules au même point \mathbf{r} ? On distinguera le cas des fermions, puis le cas des bosons avec les deux particules dans le même mode ou dans deux modes différents. Comparer à la valeur naïve $1/L^6$, qui suppose que les particules sont distribuées spatialement de façon non corrélée. On notera que la présente expérience de pensée est essentiellement réalisable, et que l'écart à la valeur naïve dans le cas des bosons correspond à l'effet Hanbury-Brown et Twiss et s'appelle aussi effet de groupement bosonique. •

Étendons la discussion précédente au cas de particules avec un spin s . Là aussi, il peut s'agir d'un pseudo-spin, c'est-à-dire que l'on peut considérer des bosons avec $s = 1/2$. Pour construire une base commode de l'espace de spin à deux particules, on additionne les deux spins, suivant l'algèbre

habituelle d'addition des moments cinétiques. On constate alors que les états de spin total $2s - k$, k allant de 0 à $2s$, sont de symétrie $(-1)^k$ sous l'échange des deux particules. Le cas bien connu $s = 1/2$ correspond au choix

$$|\text{spin}\rangle = |+\rangle \otimes |+\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |-\rangle + |-\rangle \otimes |+\rangle), |-\rangle \otimes |-\rangle \quad (40)$$

ce qui correspond au triplet des états de spin total unité, et

$$|\text{spin}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle) \quad (41)$$

ce qui est l'état singulet de spin total nul. Il est alors commode de former des états à deux particules obéissant au postulat de symétrisation factorisés en une partie de spin et une partie orbitale, de la forme $|\text{orbital}\rangle \otimes |\text{spin}\rangle$. Dans le cas des bosons, les parties orbitale et de spin sont toutes les deux symétriques ou antisymétriques. Dans le cas des fermions, les parties orbitale et de spin sont de symétries opposées.

2 Le formalisme de la seconde quantification

Une lourdeur du formalisme précédemment exposé est de faire apparaître comme intermédiaires de calcul des états non symétrisés. Nous exposons dans cette section un formalisme manipulant seulement des états complètement symétrisés ou antisymétrisés.

2.1 Opérateurs de création et d'annihilation

2.1.1 Définition

En seconde quantification, l'espace de Hilbert dans lequel on travaille est l'espace de Fock \mathcal{E} . C'est la somme directe sur toutes les valeurs possibles du nombre de particules N des espaces des états totalement symétrisés (ou antisymétrisés) à N particules :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}^{(0)} \oplus \mathcal{E}^{(1)} \oplus \mathcal{E}^{(2)} \oplus \dots \quad (42)$$

Remarquons l'introduction d'un espace des états à zéro particule, $\mathcal{E}^{(0)}$, espace de dimension 1 engendré par un chet ("ket" en anglais) normalisé à l'unité, noté $|0\rangle$, et que l'on appelle le « vide » :

$$\langle 0|0\rangle = 1. \quad (43)$$

Bien entendu, il ne faut pas confondre le vide avec le vecteur nul...

Ce « vide » joue un rôle fondamental dans le formalisme puisqu'il permet de construire tous les états symétrisés, avec un nombre arbitraire de particules, par l'action répétée d'opérateurs de création d'une particule dans l'un des états de la base $|u_\alpha\rangle$ de $\mathcal{E}^{(1)}$.

Définissons donc l'opérateur de création d'une particule dans l'état $|u\rangle$, opérateur noté $a_{|u\rangle}^+$, par son action sur un vecteur d'état symétrisé quelconque $|\psi\rangle$ à N particules. Pour $N = 0$, on pose $a_{|u\rangle}^+ |0\rangle = |u\rangle$, et pour $N \geq 1$:

$$a_{|u\rangle}^+ |\psi\rangle \equiv \sqrt{N+1} \begin{matrix} S \\ A \end{matrix} [|u\rangle \otimes |\psi\rangle] \quad (44)$$

où l'on utilise le projecteur S pour les bosons et A pour les fermions. On voit clairement sur cette définition que l'opérateur de création dépend linéairement de l'état dans lequel il crée une particule, ce qui est une propriété utile à retenir :

$$a_{\lambda_1|u_1\rangle + \lambda_2|u_2\rangle}^+ = \lambda_1 a_{|u_1\rangle}^+ + \lambda_2 a_{|u_2\rangle}^+. \quad (45)$$

Le choix du facteur de normalisation en $(N+1)^{1/2}$ se révélera bien commode par la suite. On peut l'écrire de façon plus générale comme $\hat{N}^{1/2}$ où \hat{N} est l'opérateur donnant le nombre total de particules.

L'opérateur d'annihilation d'une particule dans l'état $|u\rangle$ n'est pas l'inverse, mais l'hermitien conjugué de l'opérateur de création :

$$a_{\langle u|} = \left(a_{|u\rangle}^+ \right)^\dagger \quad (46)$$

d'où l'écriture a^\dagger plus utilisée que a^+ dans la littérature. La notation $a_{\langle u|}$ avec un cro ("bra" en anglais) en indice rappelle que l'opérateur d'annihilation dépend antilinéairement de l'état $|u\rangle$ dans lequel il annihile, c'est-à-dire linéairement du cro $\langle u|$. Déterminons son action sur un état symétrisé quelconque $|\psi\rangle$ à $N \geq 2$ particules en introduisant comme intermédiaire de calcul un état symétrisé quelconque $|\chi\rangle$ à $N-1$ particules :

$$\begin{aligned} \langle \chi | a_{\langle u|} |\psi\rangle &= \left(\langle \psi | a_{|u\rangle}^+ | \chi \rangle \right)^* \\ &= \left(\langle \psi | \sqrt{N} \begin{matrix} S \\ A \end{matrix} [|u\rangle \otimes | \chi \rangle] \right)^* \\ &= \sqrt{N} \langle \chi | \langle 1 : u | \psi \rangle \end{aligned} \quad (47)$$

où nous avons utilisé le fait que $\langle \psi | \begin{matrix} S \\ A \end{matrix} = \langle \psi |$. Ceci conduit pour $N \geq 2$ à

$$a_{\langle u|} |\psi\rangle = \sqrt{N} \langle 1 : u | \psi \rangle. \quad (48)$$

Notons qu'il est inutile de faire figurer S ou A dans cette expression car $|\psi\rangle$ est symétrisé et sa contraction par l'état $|u\rangle$ de la particule 1 donne un vecteur d'état symétrisé à $N-1$ particules. Comme précédemment, une écriture plus générale consiste à remplacer le facteur \sqrt{N} par $\sqrt{\hat{N}+1}$. Dans le cas $N = 1$, le résultat fait intervenir le vide, $a_{\langle u|} |\psi\rangle = (\langle u | \psi \rangle) |0\rangle$. Dans le cas $N = 0$, on obtient le vecteur nul.

2.1.2 Action des a et a^+ dans la base des états

Calculons les éléments de matrice des opérateurs de création et d'annihilation dans la base correctement symétrisée construite en première quantification.

Il est possible de grandement simplifier les calculs en utilisant la remarque suivante :

$$S[|u\rangle \otimes S|\chi\rangle] = S[|u\rangle \otimes |\chi\rangle] \quad (49)$$

$$A[|u\rangle \otimes A|\chi\rangle] = A[|u\rangle \otimes |\chi\rangle] \quad (50)$$

où $|\chi\rangle$ est un vecteur quelconque à N particules (non nécessairement symétrisé) et $|u\rangle$ est un vecteur quelconque à une particule.

Démonstration de la remarque. Limitons-nous au cas de l'antisymétriseur. Par linéarité en $|\chi\rangle$ et en $|u\rangle$ de la relation (50) à démontrer, nous nous ramenons au cas où $|u\rangle$ est l'un des vecteurs $|u_1\rangle$ de la base $\{|u_\alpha\rangle\}$ de l'espace des états à une particule, et où

$$|\chi\rangle = |u_2\rangle \otimes \dots \otimes |u_{N+1}\rangle. \quad (51)$$

Dans l'écriture de $A|\chi\rangle$ apparaissent des permutations σ de N objets numérotés de 2 à $N+1$: on les étend en des permutations de $N+1$ objets numérotés de 1 à $N+1$ en posant $\sigma(1) = 1$, ce qui ne change pas la signature de la permutation. Si bien que

$$|u\rangle \otimes A|\chi\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in S_{N+1}, \sigma(1)=1} \epsilon(\sigma) P_\sigma |u_1\rangle \otimes \dots \otimes |u_{N+1}\rangle. \quad (52)$$

Alors, en faisant agir A sur la relation (52) et en échangeant l'ordre des sommations, on obtient :

$$A[|u\rangle \otimes A|\chi\rangle] = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in S_{N+1}, \sigma(1)=1} \frac{1}{(N+1)!} \sum_{\sigma' \in S_{N+1}} \epsilon(\sigma)\epsilon(\sigma') P_{\sigma'} P_\sigma |u_1\rangle \otimes \dots \otimes |u_{N+1}\rangle. \quad (53)$$

Dans la somme intérieure, on pose ensuite $\sigma'' = \sigma \circ \sigma'$. On constate alors que cette somme intérieure ne dépend pas de σ , ce qui permet d'effectuer la somme sur σ et d'arriver au résultat annoncé. •

Calculons donc l'action de $a_{|u\rangle}^+$ sur l'état fermionique $|u_1, \dots, u_N\rangle$. Par linéarité de l'action de a^+ , on se ramène au cas où $|u\rangle$ est l'un des vecteurs de la base orthonormale à un corps. Il est donc commode d'introduire la notation raccourcie

$$a_\alpha \equiv a_{\langle u_\alpha |} \quad \text{et} \quad a_\alpha^+ \equiv a_{|u_\alpha\rangle}^+. \quad (54)$$

Si $|u\rangle$ est l'un des $|u_i\rangle$ peuplés, on trouve zéro. Si $|u\rangle = |u_\alpha\rangle$, α différent de $1, \dots, N$, on obtient

$$\begin{aligned} a_\alpha^+ |u_1, \dots, u_N\rangle &= \sqrt{N+1} A[|u_\alpha\rangle \otimes \sqrt{N!} A|u_1\rangle \otimes \dots \otimes |u_N\rangle] \\ &= |u_\alpha, u_1, \dots, u_N\rangle, \end{aligned} \quad (55)$$

en utilisant la remarque simplificatrice (50). Moyen mnémotechnique : en assimilant $|u_1\rangle \otimes \dots \otimes |u_N\rangle$ à une pile verticale d'assiettes, $|u_1\rangle$ étant l'assiette au sommet de la pile, on constate que l'action de

$a_{|u\rangle}^+$ revient à ajouter l'assiette $|u\rangle$ au sommet de la pile. Par ailleurs, on voit bien comment construire les vecteurs de base par l'action des a^+ sur le vide :

$$|u_1, \dots, u_N\rangle = a_1^+ \dots a_N^+ |0\rangle. \quad (56)$$

Par conjugaison, on obtient simplement l'action de l'opérateur d'annihilation :

$$a_1 |u_1, \dots, u_N\rangle = |u_2, \dots, u_N\rangle. \quad (57)$$

On donne, pour terminer le cas fermionique, les exemples suivants qui permettent au lecteur d'exercer sa sagacité :

$$a_2 |u_1, u_2\rangle = -|u_1\rangle \quad (58)$$

$$a_2 |u_1\rangle = 0 \quad (59)$$

$$a_1 |u_1\rangle = |0\rangle. \quad (60)$$

Passons maintenant au cas des bosons. Considérons l'action d'un opérateur de création sur l'état de base $|n_1 : u_1, \dots, n_k : u_k\rangle$ à N particules :

$$\begin{aligned} a_\alpha^+ ||n_1 : u_1, \dots, n_k : u_k\rangle &= \sqrt{N+1} S \left[|u_\alpha\rangle \otimes \left(\frac{N!}{n_1! \dots n_k!} \right)^{1/2} S |u_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes |u_k\rangle^{\otimes n_k} \right] \\ &= \left(\frac{(N+1)!}{n_1! \dots n_k!} \right)^{1/2} \left(\frac{n_1! \dots (n_\alpha + 1)! \dots n_k!}{(N+1)!} \right)^{1/2} \\ &\quad \times ||n_1 : u_1, \dots, n_\alpha + 1 : u_\alpha, \dots, n_k : u_k\rangle \end{aligned} \quad (61)$$

où l'on a utilisé la remarque simplificatrice (49) et où l'on a reconnu un vecteur d'état bosonique à $N+1$ particules dont on a sorti le facteur de normalisation inverse. Après simplification :

$$a_\alpha^+ ||n_1 : u_1, \dots, n_k : u_k\rangle = \sqrt{n_\alpha + 1} ||n_1 : u_1, \dots, n_\alpha + 1 : u_\alpha, \dots, n_k : u_k\rangle. \quad (62)$$

On pourra se souvenir de la présence du terme $+1$ sous la racine en prenant le cas particulier d'un mode initialement non peuplé, $n_\alpha = 0$. On obtient ainsi simplement l'écriture des vecteurs de base directement en seconde quantification :

$$||n_1 : u_1, \dots, n_k : u_k\rangle = \frac{(a_1^+)^{n_1} \dots (a_k^+)^{n_k}}{(n_1! \dots n_k!)^{1/2}} |0\rangle. \quad (63)$$

Par conjugaison, on obtient simplement l'action de l'opérateur d'annihilation :

$$a_\alpha ||n_1 : u_1, \dots, n_k : u_k\rangle = \sqrt{n_\alpha} ||n_1 : u_1, \dots, n_\alpha - 1 : u_\alpha, \dots, n_k : u_k\rangle. \quad (64)$$

2.1.3 Relations de commutation et d'anticommutation

Dans un calcul en seconde quantification, on a souvent besoin de faire migrer des opérateurs d'annihilation de la gauche vers la droite à travers des opérateurs de création, pour atteindre le vide sur lequel ils donnent zéro. Cette migration est effectuée à l'aide de relations de commutation pour les bosons, et de relations d'anticommutation pour les fermions. On utilise dans cette partie la notation raccourcie (54).

Entre a^+ et a^+ . Le plus simple est d'utiliser la définition des a^+ . Pour deux indices α et β quelconques et un état symétrisé ou antisymétrisé $|\psi\rangle$ quelconque à N particules, on a

$$a_\alpha^+ a_\beta^+ |\psi\rangle = \sqrt{N+2} \frac{S}{A} [|u_\alpha\rangle \otimes \sqrt{N+1} \frac{S}{A} (|u_\beta\rangle \otimes |\psi\rangle)] = [(N+1)(N+2)]^{1/2} \frac{S}{A} [|u_\alpha\rangle \otimes |u_\beta\rangle \otimes |\psi\rangle] \quad (65)$$

en utilisant la remarque simplificatrice (49) ou (50). Échanger l'ordre de a_α^+ et de a_β^+ revient à introduire l'opérateur P_{12} à droite de S ou A . Or $SP_{12} = S$ et $AP_{12} = -A$ donc les a^+ commutent pour les bosons et anticommulent pour les fermions :

$$\text{bosons : } [a_\alpha^+, a_\beta^+] = 0 \quad (66)$$

$$\text{fermions : } \{a_\alpha^+, a_\beta^+\} = 0 \quad (67)$$

où $[X, Y] = XY - YX$ est le commutateur de deux opérateurs et $\{X, Y\} = XY + YX$ est l'anticommutateur.

Entre a et a . En prenant l'hermitien conjugué des relations précédentes, on trouve que a_α et a_β commutent pour des bosons et anticommulent pour des fermions.

Entre a et a^+ . Un calcul direct dans la base des états donne rapidement le résultat.

Pour les bosons, a_α et a_β^+ commutent clairement si $\alpha \neq \beta$, c'est-à-dire si les états à une particule $|u_\alpha\rangle$ et $|u_\beta\rangle$ sont orthogonaux. Il reste le cas $\alpha = \beta$:

$$a_\alpha a_\alpha^+ ||n_\alpha : u_\alpha, \text{autre}\rangle = \sqrt{n_\alpha + 1} \sqrt{n_\alpha + 1} ||n_\alpha, \text{autre}\rangle \quad (68)$$

$$a_\alpha^+ a_\alpha ||n_\alpha : u_\alpha, \text{autre}\rangle = \sqrt{n_\alpha} \sqrt{n_\alpha} ||n_\alpha, \text{autre}\rangle \quad (69)$$

où « autre » représente une configuration quelconque $n_1 : u_1, \dots$ pour les modes orthogonaux à $|u_\alpha\rangle$. Pour les bosons, on arrive finalement au résultat important :

$$[a_\alpha, a_\beta^+] = \delta_{\alpha\beta} \quad (70)$$

où $\delta_{\alpha\beta}$ est le delta de Kronecker.

Pour les fermions, a_α et a_β^+ anticommulent si $\alpha \neq \beta$: il suffit de le vérifier sur les états de la forme $|u_\alpha, \text{autre}\rangle$, où « autre » est une configuration quelconque u_1, \dots pour les modes orthogonaux à $|u_\alpha\rangle$ et $|u_\beta\rangle$; en effet, l'action sur les états d'une autre forme donne zéro. Il vient :

$$a_\alpha a_\beta^+ ||u_\alpha, \text{autre}\rangle = a_\alpha ||u_\beta, u_\alpha, \text{autre}\rangle = -||u_\beta, \text{autre}\rangle \quad (71)$$

$$a_\beta^+ a_\alpha ||u_\alpha, \text{autre}\rangle = ||u_\beta, \text{autre}\rangle. \quad (72)$$

Dans le cas $\alpha = \beta$, il y a deux types d'états à considérer :

$$(a_\alpha a_\alpha^+ + a_\alpha^+ a_\alpha) |u_\alpha, \text{autre}\rangle = 0 + |u_\alpha, \text{autre}\rangle \quad (73)$$

$$(a_\alpha a_\alpha^+ + a_\alpha^+ a_\alpha) |\text{autre}\rangle = |\text{autre}\rangle + 0. \quad (74)$$

Pour les fermions, on obtient ainsi le résultat important :

$$\{a_\alpha, a_\beta^+\} = \delta_{\alpha\beta}. \quad (75)$$

Pour terminer, considérons le cas plus général où a et a^+ mettent en jeu des chets à une particule $|\phi_1\rangle$ et $|\phi_2\rangle$ quelconques donc non nécessairement orthogonaux ni même normalisés. Dans ce cas,

$$\text{bosons :} \quad [a_{\langle\phi_1|}, a_{|\phi_2\rangle}^+] = \langle\phi_1|\phi_2\rangle \quad (76)$$

$$\text{fermions :} \quad \{a_{\langle\phi_1|}, a_{|\phi_2\rangle}^+\} = \langle\phi_1|\phi_2\rangle. \quad (77)$$

La notation $a_{\langle|}$ et $a_{|}\rangle$ permet de comprendre l'ordre des indices dans le second membre. Ce résultat est obtenu en décomposant $|\phi_2\rangle$ en une composante selon $|\phi_1\rangle$ et une composante orthogonale à $|\phi_1\rangle$:

$$|\phi_2\rangle = |\phi_1\rangle \frac{\langle\phi_1|\phi_2\rangle}{\langle\phi_1|\phi_1\rangle} + |\perp\phi_1\rangle \quad (78)$$

et en utilisant la linéarité de a^+ en le chet :

$$a_{|\phi_2\rangle}^+ = \frac{\langle\phi_1|\phi_2\rangle}{\langle\phi_1|\phi_1\rangle} a_{|\phi_1\rangle}^+ + a_{|\perp\phi_1\rangle}^+. \quad (79)$$

L'opérateur a^+ à la droite du second membre commute (ou anticommute dans le cas des fermions) avec $a_{|\phi_2\rangle}^+$ et l'on arrive au résultat annoncé.

2.1.4 L'opérateur de champ

Pour clore cette section 2.1, nous introduisons une quantité très utilisée en pratique, l'opérateur de champ. En notant $|\mathbf{r}, m\rangle$ l'état à une particule parfaitement localisé dans l'espace réel de dimension d au point \mathbf{r} (\mathbf{r} vecteur à d coordonnées) et de composante de spin m suivant l'axe de quantification, on pose

$$\hat{\psi}_m(\mathbf{r}) \equiv a_{\langle\mathbf{r}, m|}. \quad (80)$$

En chaque point de l'espace, on « met » un opérateur, au lieu d'un nombre complexe pour les champs classiques, d'où le nom d'opérateur de champ. La notation utilisée dans (80) est en fait audacieuse car $|\mathbf{r}, m\rangle$ n'est pas normalisable mais appartient à une base continue. En utilisant une relation de fermeture dans la base hilbertienne à une particule $\{|u_\alpha\rangle\}$,

$$|\mathbf{r}, m\rangle = \sum_{\alpha} |u_\alpha\rangle u_{\alpha, m}^*(\mathbf{r}) \quad (81)$$

on obtient une écriture plus standard :

$$\hat{\psi}_m(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} u_{\alpha,m}(\mathbf{r}) a_{\alpha} \quad (82)$$

où $u_{\alpha,m}(\mathbf{r})$ est la fonction d'onde du mode $|u_{\alpha}\rangle$ pour la composante de spin m .

À partir des résultats précédents, on peut établir les relations de commutation ou d'anticommuation

$$\text{bosons :} \quad [\hat{\psi}_m(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{m'}^+(\mathbf{r}')] = \delta_{mm'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (83)$$

$$\text{fermions :} \quad \{\hat{\psi}_m(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{m'}^+(\mathbf{r}')\} = \delta_{mm'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (84)$$

où $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ est la distribution delta de Dirac en dimension d et $\hat{\psi}_{m'}^+(\mathbf{r}')$ peut être identifié à l'hermitien conjugué $\hat{\psi}_{m'}^{\dagger}(\mathbf{r}')$ comme il est fait habituellement dans la littérature.

2.2 Expression des observables en seconde quantification

2.2.1 Observables à un corps

Ce que nous appelons observable à un corps est un opérateur de la forme

$$\mathcal{B} = \sum_{i=1}^{\hat{N}} B(i). \quad (85)$$

L'opérateur B agit sur l'espace des états à une particule. La notation $B(i)$ représente l'opérateur agissant comme l'opérateur B sur l'état de la particule i et agissant comme l'identité sur l'état des autres particules. Des exemples d'opérateurs à un corps sont l'opérateur nombre total de particules, pour lequel B est l'identité, et l'opérateur énergie cinétique totale, pour lequel $B = \mathbf{p}^2 / (2m)$ est l'opérateur énergie cinétique d'une particule d'opérateur impulsion \mathbf{p} et de masse m . Mais aussi l'opérateur $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ donnant la densité de particules au point \mathbf{r} :

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{\hat{N}} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) \quad (86)$$

où \mathbf{r}_i est l'opérateur position de la particule i .

Pour écrire \mathcal{B} en seconde quantification, considérons comme intermédiaire de calcul un état $|\psi\rangle$ à N particules, correctement symétrisé ou antisymétrisé. Comme \mathcal{B} commute avec tous les opérateurs de permutation, on a

$$\mathcal{B}|\psi\rangle = \underset{A}{S} \mathcal{B}|\psi\rangle = \underset{A}{S} \mathcal{B} \underset{A}{S} |\psi\rangle. \quad (87)$$

Or $B(i) = P_{1i}B(1)P_{1i}$ donc $SB(i)S = SB(1)S$, de même que $AB(i)A = AB(1)A$. On se ramène ainsi à une action sur la particule 1, suivie d'une symétrisation ou antisymétrisation :

$$\mathcal{B}|\psi\rangle = N \underset{A}{S} B(1)|\psi\rangle. \quad (88)$$

Utilisons ensuite la décomposition de B dans la base orthonormée de l'espace des états à une particule :

$$\mathcal{B}|\psi\rangle = N \sum_{\alpha,\beta} \langle u_\beta | B | u_\alpha \rangle \frac{S}{A} |1 : u_\beta\rangle \langle 1 : u_\alpha | \psi \rangle. \quad (89)$$

On reconnaît tout à droite l'action d'un opérateur d'annihilation; en extrayant le facteur \sqrt{N} requis, il reste

$$\mathcal{B}|\psi\rangle = \sqrt{N} \sum_{\alpha,\beta} \langle u_\beta | B | u_\alpha \rangle \frac{S}{A} |1 : u_\beta\rangle \otimes a_\alpha |\psi\rangle. \quad (90)$$

On reconnaît alors, à droite, l'action d'un opérateur de création; en extrayant encore un facteur \sqrt{N} , on arrive au résultat final :

$$\mathcal{B} = \sum_{\alpha,\beta} \langle u_\beta | B | u_\alpha \rangle a_\beta^+ a_\alpha. \quad (91)$$

2.2.2 Observables à deux corps

Les observables à deux corps sont de la forme

$$\mathcal{C} = \sum_{i \neq j} C(i, j) \quad (92)$$

où les sommes sur i et sur j vont de 1 à \hat{N} avec la contrainte $i \neq j$. L'opérateur C agit sur l'espace de Hilbert mathématique à deux particules $\mathcal{E}^{(1)} \otimes \mathcal{E}^{(1)}$. La notation $C(i, j)$ signifie une action égale à C sur l'espace produit tensoriel des états de la particule i et de la particule j , et une action identité pour les autres particules. Pour être parfaitement clair, écrivons $C(i, j)$ à l'aide la base à une particule :

$$C(i, j) = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \langle u_\gamma | \langle u_\delta | C | u_\alpha \rangle | u_\beta \rangle | i : u_\gamma \rangle | j : u_\delta \rangle \langle i : u_\alpha | \langle j : u_\beta |. \quad (93)$$

Il n'est pas nécessaire d'avoir $C(i, j) = C(j, i)$ pour la suite, même si c'est souvent le cas physiquement. Un bon exemple d'observable à deux corps est l'opérateur énergie d'interaction pour des interactions binaires :

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (94)$$

où $V(r)$ est le potentiel d'interaction entre deux particules à une distance r , \mathbf{r}_i et \mathbf{r}_j sont les opérateurs positions des particules i et j . La présence du facteur $1/2$ fait que $C(i, j) = V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)/2$. Un autre exemple est l'opérateur densité de paires de particules :

$$\hat{\rho}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{i \neq j} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}') \quad (95)$$

où \mathbf{r} et \mathbf{r}' sont des vecteurs positions classiques et δ la distribution de Dirac en dimension d . Dans ce second exemple, l'opérateur $C(i, j) = \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}')$ n'est pas symétrique sous l'échange des particules i et j (sauf si $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$).

Pour écrire \mathcal{C} en seconde quantification, on se réduit, comme pour les observables à un corps, à l'action de $C(1,2)$ sur l'intermédiaire de calcul $|\psi\rangle \in \mathcal{E}^{(N)}$:

$$\mathcal{C}|\psi\rangle = \underset{A}{S} \mathcal{C} \underset{A}{S} |\psi\rangle = N(N-1) \underset{A}{S} C(1,2)|\psi\rangle. \quad (96)$$

On peut ensuite se restreindre au cas d'une seule dyade de la somme (93). On remarque d'abord que

$$N(N-1)\langle 1 : u_\alpha | \langle 2 : u_\beta | |\psi\rangle = \sqrt{N(N-1)} \langle 2 : u_\beta | a_\alpha |\psi\rangle \quad (97)$$

où l'on notera l'ordre des opérations, et le fait que les facteurs du produit tensoriel dans le vecteur $a_\alpha |\psi\rangle$ sont numérotés de 2 à N , si bien que le produit scalaire avec $\langle 2 : u_\beta |$ constitue une contraction sur l'état de la « première » particule (numérotée 2). Ainsi

$$\sqrt{N(N-1)} \langle 2 : u_\beta | a_\alpha |\psi\rangle = \sqrt{N(N-1)} a_\beta a_\alpha |\psi\rangle. \quad (98)$$

Et pour la même raison,

$$\begin{aligned} \sqrt{N(N-1)} \underset{A}{S} (|1 : u_\gamma\rangle |2 : u_\delta\rangle a_\beta a_\alpha |\psi\rangle) &= \sqrt{N(N-1)} \underset{A}{S} \left\{ |1 : u_\gamma\rangle \left[\underset{A}{S} |2 : u_\delta\rangle a_\beta a_\alpha |\psi\rangle \right] \right\} \\ &= \sqrt{N} \underset{A}{S} |1 : u_\gamma\rangle a_\delta^+ a_\beta a_\alpha |\psi\rangle \end{aligned} \quad (99)$$

$$= a_\gamma^+ a_\delta^+ a_\beta a_\alpha |\psi\rangle \quad (100)$$

où l'on a utilisé la remarque simplificatrice (49) ou (50) à l'envers, pour ajouter un facteur S ou A entre les deux chets.

En rétablissant la somme sur les indices de la base, on obtient finalement :

$$\mathcal{C} = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle u_\gamma | \langle u_\delta | C | u_\alpha \rangle | u_\beta \rangle a_\gamma^+ a_\delta^+ a_\beta a_\alpha. \quad (101)$$

L'ordre des opérateurs est important pour les fermions. On remarquera l'inversion de l'ordre des indices α et β entre l'élément de matrice de C et les opérateurs d'annihilation. On peut se souvenir de l'ordre à l'aide de la règle de la pile d'assiettes : pour passer de la pile α, β à la pile γ, δ , où l'on rappelle que l'assiette la plus à gauche dans un chet est en haut de la pile, il faut d'abord annihiler l'assiette α , puis l'assiette β , ensuite créer l'assiette δ et enfin créer l'assiette γ .

2.3 Évolution de l'opérateur de champ pour un hamiltonien typique

2.3.1 Un hamiltonien typique

Pour des particules non relativistes et sans spin, dans un potentiel extérieur $U(\mathbf{r})$ et en interaction binaire par le potentiel $V(r_{12})$, l'hamiltonien en première quantification vaut simplement :

$$H = \sum_{i=1}^{\hat{N}} \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (102)$$

C'est une somme d'un opérateur à un corps et d'un opérateur à deux corps. Nous allons écrire cet hamiltonien en seconde quantification en termes de l'opérateur de champ, donc en utilisant la base continue $|\mathbf{r}\rangle$ plutôt que la base discrète $|u_\alpha\rangle$, par transposition directe des résultats de la section 2.2.

Détaillons la partie à un corps :

$$H_{\text{un corps}} = \int d^d r_1 \int d^d r_2 \langle \mathbf{r}_2 | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) | \mathbf{r}_1 \rangle \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1). \quad (103)$$

avec d la dimension de l'espace. L'élément de matrice de l'opérateur potentiel extérieur est diagonal :

$$\langle \mathbf{r}_2 | U(\mathbf{r}) | \mathbf{r}_1 \rangle = U(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (104)$$

L'intégration sur \mathbf{r}_2 est alors immédiate. L'opérateur énergie cinétique est proportionnel au laplacien en représentation position :

$$\langle \mathbf{r}_2 | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} | \mathbf{r}_1 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}_2} \langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{r}_1 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \delta)(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}_1} \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1). \quad (105)$$

En intégrant par parties par rapport à \mathbf{r}_1 , on fait porter l'action du laplacien $\Delta_{\mathbf{r}_1}$ sur l'opérateur de champ $\hat{\psi}(\mathbf{r}_1)$, et le facteur $\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$ permet d'intégrer directement sur \mathbf{r}_2 . On obtient ainsi, en renommant en \mathbf{r} la variable muette \mathbf{r}_1 :

$$H_{\text{un corps}} = \int d^d r \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \Delta \hat{\psi}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \right]. \quad (106)$$

Par ailleurs, on rappelle que l'opérateur énergie cinétique est représentable par $-\hbar^2 \Delta / (2m)$ sous certaines conditions, assurant en particulier que $-\Delta$ est hermitien positif. C'est le cas lorsque les fonctions d'onde s'annulent assez rapidement à l'infini (cas d'un système piégé dans un potentiel harmonique) ou lorsqu'on a enfermé le système dans une boîte avec des conditions aux limites périodiques. Cette discussion se transpose à la seconde quantification. Par intégration par parties, on peut arriver à l'écriture suivante de l'énergie cinétique, manifestement positive puisque $\hat{\psi}^+(\mathbf{r}) = [\hat{\psi}(\mathbf{r})]^\dagger = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$:

$$H_{\text{cin}} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^d r \mathbf{grad} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{grad} \hat{\psi}(\mathbf{r}). \quad (107)$$

Il reste à traiter le terme d'interaction. On obtient *a priori* une somme quadruple sur des positions $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4$. L'élément de matrice du potentiel d'interaction est cependant diagonal :

$$\langle \mathbf{r}_3 | \langle \mathbf{r}_4 | V | \mathbf{r}_1 \rangle | \mathbf{r}_2 \rangle = V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \delta(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2). \quad (108)$$

On peut donc intégrer directement sur \mathbf{r}_3 et \mathbf{r}_4 . En renommant en \mathbf{r} et \mathbf{r}' les variables muettes \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 , on arrive à

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int d^d r \int d^d r' V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}). \quad (109)$$

2.3.2 Équations du mouvement pour l'opérateur de champ

On se place ici en point de vue de Heisenberg : le vecteur d'état du système n'évolue pas, les observables évoluent. Ainsi, l'opérateur de champ en point de vue de Heisenberg à l'instant t , repéré par l'indice \mathcal{H} , se déduit de l'opérateur de champ initial selon l'expression :

$$\hat{\psi}_{\mathcal{H}}(\mathbf{r}_0, t) = \hat{U}(t)^\dagger \hat{\psi}(\mathbf{r}_0) \hat{U}(t) \quad (110)$$

où $\hat{U}(t)$ est l'opérateur d'évolution à \hat{N} corps de l'instant 0 à l'instant t . On rappelle que $\hat{U}(t)$ est solution de

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t) = H(t) \hat{U}(t) \quad (111)$$

avec la condition initiale $\hat{U}(0) = 1$. Dans le cas où l'hamiltonien H ne dépend pas du temps, l'intégration formelle de cette équation donne $\hat{U}(t) = \exp(-iHt/\hbar)$. En dérivant l'équation (110) par rapport au temps, on obtient l'équation d'évolution de $\hat{\psi}_{\mathcal{H}}(\mathbf{r}_0, t)$:

$$i\hbar \partial_t \hat{\psi}_{\mathcal{H}}(\mathbf{r}_0, t) = \hat{U}(t)^\dagger [\hat{\psi}(\mathbf{r}_0), H(t)] \hat{U}(t). \quad (112)$$

Il suffit donc de calculer un commutateur en point de vue de Schrödinger entre l'opérateur de champ et l'hamiltonien à l'instant t , ce qui conduit à une expression de type polynomial en $\hat{\psi}$ et $\hat{\psi}^+$; on passe ensuite en point de vue de Heisenberg, ce qui revient à remplacer tous les $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ par $\hat{\psi}_{\mathcal{H}}(\mathbf{r}, t)$ et tous les $\hat{\psi}^+(\mathbf{r})$ par $\hat{\psi}_{\mathcal{H}}^+(\mathbf{r}, t)$. Dans la suite, on omettra l'indice \mathcal{H} , la dépendance en temps de $\hat{\psi}_{\mathcal{H}}$ suffisant à lever l'ambiguïté.

Cas des bosons. Le commutateur est facile à calculer car, justement, les opérateurs de champ bosoniques obéissent à des relations de commutation. Il suffit d'utiliser le fait que $[A, \cdot]$ agit comme une dérivation :

$$[A, B_1 \dots B_n] = [A, B_1] B_2 \dots B_n + \dots + B_1 \dots B_{n-1} [A, B_n]. \quad (113)$$

Les seules contributions non nulles proviennent de commutateurs de $\hat{\psi}(\mathbf{r}_0)$ avec des $\hat{\psi}^+(\mathbf{r})$. Pour le commutateur avec l'énergie cinétique, on a :

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}_0), H_{\text{cin}}] = \int d^d r [\hat{\psi}(\mathbf{r}_0), \hat{\psi}^+(\mathbf{r})] \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \hat{\psi}(\mathbf{r}) \right) \quad (114)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \hat{\psi}(\mathbf{r}_0). \quad (115)$$

Le commutateur avec l'énergie d'interaction fait intervenir *a priori* deux termes, l'un avec $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$ et l'autre avec $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_0$, puisque l'énergie d'interaction est de degré deux en $\hat{\psi}^+$:

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}_0), H_{\text{int}}] = \frac{1}{2} \left[\int d^d r' V(|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'|) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}_0) + \int d^d r V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}_0) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \right]. \quad (116)$$

Il suffit de renommer \mathbf{r} en \mathbf{r}' et d'utiliser la commutation des $\hat{\psi}$ entre eux pour constater que ces termes sont en fait égaux, parce que le potentiel $V(1, 2)$ est ici invariant par échange des particules 1 et 2.

On obtient finalement l'équation du mouvement

$$i\hbar\partial_t\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r}, t) + \int d^d r' V(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, t)\hat{\psi}^+(\mathbf{r}', t)\hat{\psi}(\mathbf{r}', t) \right] \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \quad (117)$$

dans le cas général où les potentiels extérieur et d'interaction peuvent dépendre du temps.

La partie de (117) sans interaction coïncide avec l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde d'une particule; la variable est cependant maintenant un champ quantique, et non plus un champ classique (comme la fonction d'onde) : on a donc, d'une certaine façon, quantifié l'équation de Schrödinger! D'où l'appellation « seconde quantification ». Cette équation sans interaction est linéaire et peut donc être intégrée, au moins formellement, en termes de l'opérateur d'évolution à une particule, ce qui était prévisible physiquement.

La partie de (117) due aux interactions s'interprète bien physiquement si l'on réalise que l'expression $\hat{\psi}^+(\mathbf{r}', t)\hat{\psi}(\mathbf{r}', t)$ est l'opérateur donnant la densité de particules au point \mathbf{r}' à l'instant t , en point de vue de Heisenberg. Le champ au point \mathbf{r} voit ainsi un potentiel venant des interactions et consistant en la convolution du potentiel d'interaction et de l'opérateur donnant la densité. Cette interprétation simple ne doit pas masquer le fait qu'il est en général impossible d'intégrer une équation non linéaire sur le champ $\hat{\psi}$. Dans les approximations de type champ moyen, on remplace l'opérateur donnant la densité par une valeur moyenne, ce qui conduit à un problème non exact mais beaucoup plus facile à traiter.

Cas des fermions. Le calcul des commutateurs est un peu plus long pour les fermions, car les opérateurs de champ obéissent à des relations d'anticommutation. Mais on constate vite que les résultats finals sont du même type que pour les bosons, car chaque terme de l'hamiltonien contient un nombre pair de facteurs.

Calculons en effet le commutateur avec un produit de deux facteurs :

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}_0), \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}')] = ? \quad (118)$$

On part du premier terme du commutateur puis on fait migrer $\hat{\psi}(\mathbf{r}_0)$ vers l'extrême droite par anticommuation :

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}_0)\hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\hat{\psi}(\mathbf{r}') - \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}_0)\hat{\psi}(\mathbf{r}') \quad (119)$$

$$= \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\hat{\psi}(\mathbf{r}') + \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}_0). \quad (120)$$

Ainsi

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}_0), \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\hat{\psi}(\mathbf{r}'). \quad (121)$$

La forme du résultat est strictement la même que pour les bosons. En prenant le laplacien de cette relation par rapport à \mathbf{r}' puis en faisant $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$, on trouve que la contribution du terme d'énergie cinétique est de même forme que pour les bosons :

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}_0), \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\Delta\hat{\psi}(\mathbf{r})] = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\Delta\hat{\psi}(\mathbf{r}). \quad (122)$$

La même conclusion s'impose pour la contribution du terme d'interaction; on trouve que

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}_0), \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}^+(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r})] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\hat{\psi}^+(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}_0) - \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0)\hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}_0)\hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (123)$$

ce qui a l'air de différer des bosons à cause du signe moins devant le second terme, mais ce qui prend la même forme que le cas bosonique lorsqu'on fait anticommute $\hat{\psi}(\mathbf{r}_0)$ et $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ dans ce second terme! On voit bien cependant qu'il faut être prudent sur cette analogie bosons-fermions. En tout cas, l'équation du mouvement sous la forme (117) s'applique aussi au cas des fermions.

3 Applications de la seconde quantification

3.1 Le théorème de Wick

3.1.1 Le problème physique considéré

Il arrive souvent que l'on ait à calculer la valeur moyenne d'observables pour un système de particules indiscernables dont l'opérateur densité est de la forme :

$$\rho = \frac{1}{\Xi} \exp\left(-\sum_{\alpha} v_{\alpha} a_{\alpha}^+ a_{\alpha}\right) \quad (124)$$

où les v_{α} sont des nombres réels quelconques pour des fermions et strictement positifs pour des bosons, les opérateurs de création a_{α}^+ et d'annihilation a_{α} obéissent aux relations de commutation ou d'anticommutation habituelles, par exemple $[a_{\alpha}, a_{\beta}^+] = \delta_{\alpha\beta}$ pour des bosons et $\{a_{\alpha}, a_{\beta}^+\} = \delta_{\alpha\beta}$ pour des fermions, et Ξ est un facteur de normalisation, assurant que la trace de l'opérateur densité vaut un; c'est l'existence de cette trace qui requiert $v_{\alpha} > 0$ pour les bosons.

Un opérateur densité de cette forme est dit gaussien en le champ. On peut dans ce cas ramener le calcul de la valeur moyenne d'une observable à n corps aux valeurs moyennes d'observables à un corps, c'est-à-dire que la valeur moyenne d'un produit d'un nombre quelconque $k = 2n$ d'opérateurs de création ou d'annihilation peut s'exprimer à l'aide de valeurs moyennes de produits de deux tels opérateurs seulement. On utilise pour cela le théorème de Wick, généralisant au cas quantique une procédure bien connue dans le cas de variables aléatoires gaussiennes classiques.

Donnons un exemple simple mais important de système physique dont l'opérateur densité est gaussien : il s'agit de l'équilibre thermodynamique d'un gaz sans interaction dans l'ensemble grand canonique de potentiel chimique μ et température T . Dans ce cas, en effet,

$$\rho = \frac{1}{\Xi} \exp[-\beta(H - \mu\hat{N})] \quad (125)$$

où Ξ est la fonction de partition grand canonique, $\beta = 1/k_{\text{B}}T$, $H = \sum_{i=1}^{\hat{N}} h(i)$ est l'hamiltonien du système, somme de termes à un corps puisque le gaz est parfait, et \hat{N} est l'opérateur nombre total

de particules. Introduisons la base orthonormale $\{|u_\alpha\rangle\}$ à une particule diagonalisant l'hamiltonien à une particule h :

$$h|u_\alpha\rangle = \epsilon_\alpha|u_\alpha\rangle. \quad (126)$$

En notant $a_\alpha = a_{\langle u_\alpha|}$, on obtient en seconde quantification

$$H - \mu\hat{N} = \sum_\alpha (\epsilon_\alpha - \mu) a_\alpha^+ a_\alpha, \quad (127)$$

ce qui conduit bien à un ρ gaussien avec

$$v_\alpha = \beta(\epsilon_\alpha - \mu). \quad (128)$$

Le théorème de Wick s'appliquera donc à tous les gaz parfaits dans l'ensemble grand canonique. Notons bien qu'il ne s'applique pas en général à l'ensemble canonique, ensemble dans lequel le nombre total de particules est fixé : l'opérateur densité s'écrit alors

$$\rho_{\text{can}} = \frac{1}{Z} P_N e^{-\beta H} \quad (129)$$

où P_N projette sur le sous-espace à N particules, et n'est donc pas gaussien. On peut néanmoins « canoniser » l'ensemble grand canonique en utilisant l'identité

$$P_N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\theta(\hat{N}-N)} \quad (130)$$

ce qui fait apparaître formellement un potentiel chimique complexe $\mu(\theta) = \mu + i\theta/\beta$, n'invalidant pas le théorème de Wick. L'intégrale finale sur θ doit en général être calculée numériquement. Comme nous le verrons, un cas particulier important où l'ensemble grand canonique coïncide avec l'ensemble canonique est le gaz parfait de fermions à la limite d'une température nulle, avec un potentiel chimique fixé différent de tous les ϵ_α .

Par ailleurs, les opérateurs densité gaussiens apparaissent aussi dans le cas du gaz avec interaction, dans les méthodes variationnelles où l'on approxime le vrai opérateur densité thermique par le « meilleur » opérateur densité gaussien. C'est le cas des approximations de champ moyen de Hartree-Fock et de Hartree-Fock-Bogolioubov, applicables aussi bien aux bosons qu'aux fermions. Ceci inclut la fameuse théorie BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) de la superfluidité ou de la supraconductivité de fermions en interaction faiblement attractive. Pour terminer, la méthode de Bogolioubov, que nous verrons, et qui s'applique au gaz de bosons en interaction faiblement répulsive à basse température, conduit aussi à l'équilibre thermique à un opérateur densité gaussien.

3.1.2 Première étape dans la résolution

On souhaite donc calculer la valeur moyenne, dans l'opérateur gaussien (124), du produit de k facteurs

$$O = b_1 \dots b_k, \quad (131)$$

chaque facteur b_i étant une combinaison linéaire *quelconque* des opérateurs a et a^+ . On rencontre presque toujours le cas d'une combinaison linéaire des a ou des a^+ : pour prendre l'exemple du gaz parfait, la base à une particule utilisée pour écrire de façon simple les observables en seconde quantification n'est en général pas la base propre de l'hamiltonien à un corps h . De plus, l'hamiltonien de Bogolioubov et l'hamiltonien BCS comportent des termes très importants, à l'origine de la superfluidité, couplant des champs à leurs hermitiens conjugués, d'où des combinaisons linéaires des a et des a^+ . Notons par ailleurs que l'entier k doit être pair si l'on veut obtenir une valeur moyenne non nulle (puisque ρ commute avec l'opérateur nombre d'excitations $\sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$ alors que chaque b_j change le nombre d'excitations d'une unité).

Notre obtention du théorème de Wick est inspirée du cours de physique statistique de Jacques Descloizeaux au DEA de physique quantique de l'ENS-Paris 6 en 1988. L'idée est de faire faire « un tour complet » à b_1 dans l'expression

$$\langle O \rangle = \text{Tr} [b_1 \dots b_k \rho]. \quad (132)$$

On utilise d'abord l'invariance de la trace par permutation circulaire des opérateurs :

$$\langle O \rangle = \text{Tr} [b_2 \dots b_k \rho b_1]. \quad (133)$$

Puis, on renonce *provisoirement* à traiter le cas le plus général : on suppose temporairement que b_1 vaut exactement l'un des opérateurs a_{α} ou a_{α}^{\dagger} . Dans ce cas, il existe un nombre λ , dépendant de la valeur de b_1 et du paramètre v_{α} , tel que

$$b_1 e^{-\sum_{\gamma} v_{\gamma} a_{\gamma}^{\dagger} a_{\gamma}} = \lambda e^{-\sum_{\gamma} v_{\gamma} a_{\gamma}^{\dagger} a_{\gamma}} b_1. \quad (134)$$

Si $b_1 = a_{\alpha}^{\dagger}$, $\lambda = \exp(v_{\alpha})$. Si $b_1 = a_{\alpha}$, $\lambda = \exp(-v_{\alpha})$. Pour vérifier ce fait, on constate d'abord qu'on peut se ramener au cas d'un seul mode, puisque b_1 commute avec les $a^{\dagger} a$ des autres modes. On peut ensuite faire une vérification directe dans la base de Fock. Ou utiliser la relation de commutation ou d'anticommutation à l'aide de l'astuce de calcul suivante :

$$X(\tau) \equiv e^{\tau a^{\dagger} a} a e^{-\tau a^{\dagger} a} \quad (135)$$

obéit à l'équation du mouvement $dX(\tau)/d\tau = -X(\tau)$, τ réel, avec la condition initiale $X(0) = a$, ce que l'on intègre facilement.

À l'aide de la relation (134), on fait donc passer b_1 à travers ρ :

$$\lambda \langle O \rangle = \text{Tr} [b_2 \dots b_k b_1 \rho]. \quad (136)$$

Il reste à faire passer b_1 à travers chacun des facteurs b_2, \dots, b_k . Les calculs explicites dépendent du caractère bosonique ou fermionique des particules.

3.1.3 Fin de la résolution pour les bosons

Le calcul est direct pour les bosons puisque les opérateurs obéissent à des relations de commutation et $[b_1, \cdot]$ agit comme une dérivation :

$$b_2 \dots b_k b_1 = b_1 \dots b_k - [b_1, b_2 \dots b_k] \quad (137)$$

$$= b_1 \dots b_k - \sum_{j=2}^k b_2 \dots b_{j-1} [b_1, b_j] b_{j+1} \dots b_k. \quad (138)$$

On constate que $[b_1, b_j]$ est un « nombre », c'est-à-dire qu'il est proportionnel à l'identité, puisque les b sont des combinaisons linéaires de a et a^+ ; on peut donc déplacer le commutateur $[b_1, b_j]$ tout à gauche. En remplaçant l'expression obtenue pour $b_2 \dots b_k b_1$ dans le second membre de l'équation (136), on constate que $\langle O \rangle$ apparaît désormais à la fois au premier et au second membre ; en le regroupant au premier membre, on a :

$$\langle O \rangle = \sum_{j=2}^k \frac{[b_1, b_j]}{1 - \lambda} \langle b_2 \dots b_{j-1} b_{j+1} \dots b_k \rangle. \quad (139)$$

On ramène ainsi le calcul de la valeur moyenne de k facteurs au calcul de valeurs moyennes de $k - 2$ facteurs.

Souvenons-nous cependant que notre calcul n'est pour l'instant pas totalement général, puisque nous avons supposé que b_1 est exactement un a_α ou un a_α^+ . En utilisant une propriété de linéarité, nous allons arriver très simplement au cas général. L'astuce consiste d'abord à appliquer la relation précédente (139) au cas $k = 2$:

$$\langle b_1 b_2 \rangle = \frac{[b_1, b_2]}{1 - \lambda}. \quad (140)$$

On peut donc récrire cette relation précédente ainsi :

$$\langle b_1 \dots b_k \rangle = \sum_{j=2}^k \langle b_1 b_j \rangle \langle b_2 \dots b_{j-1} b_{j+1} \dots b_k \rangle. \quad (141)$$

Comme cette écriture est manifestement linéaire en b_1 , elle est valable pour un opérateur b_1 superposition quelconque des a et des a^+ ! Ceci illustre la puissance des raisonnements s'appuyant sur la linéarité.

Petite parenthèse : on retrouve immédiatement à partir de (140) la loi de Bose pour les nombres d'occupation des modes. En prenant $b_1 = a_\alpha^+$ et $b_2 = a_\beta$, et en utilisant la valeur de λ donnée plus haut, on obtient

$$\langle a_\alpha^+ a_\beta \rangle = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{e^{\nu_\alpha} - 1} \quad (142)$$

avec $\nu_\alpha = \beta(\epsilon_\alpha - \mu)$ dans le cas de l'équilibre thermodynamique grand canonique d'un gaz parfait.

Revenons au théorème de Wick. Sa forme traditionnelle pour les bosons est obtenue en itérant la relation de récurrence (141), ce qui conduit à la règle suivante :

$$\langle b_1 \dots b_k \rangle = \sum_{\text{contractions binaires}} \langle b_1 b_\alpha \rangle \langle b_\beta b_\gamma \rangle \dots \langle b_\psi b_\omega \rangle. \quad (143)$$

Plus explicitement, la somme est effectuée sur toutes les contractions binaires construites ainsi. On part de la gauche, on sélectionne b_1 puis un partenaire de contraction quelconque b_α parmi les facteurs restants. On sélectionne ensuite le prochain facteur libre, toujours en partant de la gauche : si $\alpha \neq 2$, ce facteur libre est b_2 , sinon c'est b_3 ; on contracte ensuite ce facteur libre avec l'un quelconque des $k-3$ facteurs libres restants, b_γ . Ainsi de suite. Donnons l'exemple de $k=4$:

$$\langle b_1 b_2 b_3 b_4 \rangle = \langle b_1 b_2 \rangle \langle b_3 b_4 \rangle + \langle b_1 b_3 \rangle \langle b_2 b_4 \rangle + \langle b_1 b_4 \rangle \langle b_2 b_3 \rangle. \quad (144)$$

Exercice. Montrer que $\langle e^{i\hat{\theta}} \rangle = \exp(-\langle \hat{\theta}^2 \rangle / 2)$ lorsque l'opérateur $\hat{\theta}$ est une combinaison linéaire des a et des a^+ et que la moyenne est prise dans un opérateur densité gaussien. On développera l'exponentielle en série entière, on utilisera le théorème de Wick pour chacun des termes, puis l'on resommara le résultat. •

3.1.4 Fin de la résolution pour les fermions

Le calcul est en fait très similaire pour les fermions. On fait progresser b_1 de la droite vers la gauche à travers les facteurs b_2, \dots, b_k en faisant apparaître les anticommutateurs $\{b_1, b_j\}$ qui sont des nombres et commutent avec le reste :

$$\begin{aligned} b_2 \dots b_k b_1 &= b_2 \dots b_{k-1} [\{b_1, b_k\} - b_1 b_k] \\ &= \{b_1, b_k\} b_2 \dots b_{k-1} - b_2 \dots b_{k-1} b_1 b_k \\ &= \{b_1, b_k\} b_2 \dots b_{k-1} - \{b_1, b_{k-1}\} b_2 \dots b_{k-2} b_k + b_2 \dots b_{k-2} b_1 b_{k-1} b_k. \end{aligned} \quad (145)$$

À force d'itérer, on arrive à intuiter la forme finale :

$$b_2 \dots b_k b_1 = (-1)^{k-1} b_1 \dots b_k + \sum_{j=2}^k \{b_1, b_j\} (-1)^{k-j} b_2 \dots b_{j-1} b_{j+1} \dots b_k. \quad (146)$$

En fait, ici k est pair, si bien que $(-1)^k = 1$. En reportant cette expression dans le second membre de (136), on arrive à

$$\langle O \rangle = \sum_{j=2}^k (-1)^j \frac{\{b_1, b_j\}}{1+\lambda} \langle b_2 \dots b_{j-1} b_{j+1} \dots b_k \rangle. \quad (147)$$

Comme pour les bosons, on peut spécialiser au cas $k=2$ pour éliminer λ :

$$\langle b_1 b_2 \rangle = \frac{\{b_1, b_2\}}{1+\lambda}, \quad (148)$$

ce qui permet de retrouver la loi de Fermi-Dirac :

$$\langle a_\alpha^+ a_\beta \rangle = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{e^{\nu_\alpha} + 1} \quad (149)$$

mais surtout d'arriver à une forme générale de la relation de récurrence pour les fermions, valable (par linéarité) pour un opérateur b_1 combinaison linéaire quelconque des a et des a^+ :

$$\langle b_1 \dots b_k \rangle = \sum_{j=2}^k (-1)^j \langle b_1 b_j \rangle \langle b_2 \dots b_{j-1} b_{j+1} \dots b_k \rangle. \quad (150)$$

Elle diffère de celle des bosons par l'apparition d'un signe alterné $(-1)^j$.

Dans sa forme traditionnelle, le théorème de Wick pour les fermions s'obtient par itération de la relation de récurrence précédente et s'écrit en termes d'une somme sur des contractions binaires :

$$\langle b_1 \dots b_k \rangle = \sum_{\text{contractions binaires}} \epsilon(\sigma) \langle b_1 b_\alpha \rangle \langle b_\beta b_\gamma \rangle \dots \langle b_\psi b_\omega \rangle. \quad (151)$$

Les contractions sont construites exactement comme dans le cas des bosons, donc comme expliqué après l'équation (143). Une différence cruciale cependant est que la contribution de chaque terme dans la somme sur les contractions est affectée d'un signe $\epsilon(\sigma)$, qui est simplement la signature de la permutation σ faisant passer de l'arrangement $(1, 2, \dots, k)$ à l'arrangement $(1, \alpha, \beta, \dots, \psi, \omega)$.

Donnons l'exemple générique pour $k = 4$:

$$\langle b_1 b_2 b_3 b_4 \rangle = \langle b_1 b_2 \rangle \langle b_3 b_4 \rangle - \langle b_1 b_3 \rangle \langle b_2 b_4 \rangle + \langle b_1 b_4 \rangle \langle b_2 b_3 \rangle. \quad (152)$$

On notera le signe $-$ devant le second terme du membre de gauche.

3.1.5 Un exemple d'application du théorème de Wick

On calcule les fluctuations du nombre total de particules pour un gaz parfait dans l'ensemble grand canonique. On choisit comme base des états à une particule la base propre de l'hamiltonien à un corps. L'opérateur nombre total de particules s'écrit en seconde quantification $\hat{N} = \sum_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha$. On introduit les nombres moyens d'occupation des modes

$$n_\alpha = \langle a_\alpha^+ a_\alpha \rangle \quad (153)$$

en fonction desquels, en vertu du théorème de Wick, les valeurs moyennes d'observables vont s'exprimer. Calculons le second moment du nombre de particules :

$$\langle \hat{N}^2 \rangle = \sum_{\alpha, \beta} \langle a_\alpha^+ a_\alpha a_\beta^+ a_\beta \rangle \quad (154)$$

$$= \sum_{\alpha, \beta} \langle a_\alpha^+ a_\alpha \rangle \langle a_\beta^+ a_\beta \rangle + \langle a_\alpha^+ a_\beta \rangle \langle a_\alpha a_\beta^+ \rangle. \quad (155)$$

On a utilisé immédiatement le fait que seules des contractions entre un a et un a^+ peuvent donner un résultat non nul. On constate également que le premier terme dans le second membre conduit à une factorisation en une somme sur α fois une somme sur β , tandis que le second terme peut être non nul seulement si $\alpha = \beta$. En utilisant les relations de commutation ou d'anticommutation, on fait apparaître les nombres d'occupation dans ce second terme :

$$\langle a_\alpha a_\alpha^\dagger \rangle = 1 \pm n_\alpha \quad (156)$$

où le signe supérieur $+$ s'applique aux bosons et le signe inférieur $-$ s'applique aux fermions. En utilisant $\langle \hat{N} \rangle = \sum_\alpha n_\alpha$, on aboutit à l'expression suivante pour la variance du nombre de particules :

$$\text{Var } \hat{N} = \sum_\alpha n_\alpha (1 \pm n_\alpha). \quad (157)$$

Un peu de terminologie : si le nombre de particules était distribué selon une loi de Poisson de moyenne $\langle \hat{N} \rangle$, $P(N) = (\langle \hat{N} \rangle^N / N!) \exp(-\langle \hat{N} \rangle)$, on aurait exactement $\text{Var } \hat{N} = \langle \hat{N} \rangle$. Dans le cas des bosons, la vraie variance de \hat{N} est supérieure à la valeur poissonnienne, les fluctuations sont dites *superpoissonniennes*. Dans le cas des fermions, la vraie variance de \hat{N} est inférieure à la valeur poissonnienne, les fluctuations sont dites *subpoissonniennes*. Étudions plus en détail ce qu'il advient dans la limite de basse température.

Dans le cas des fermions, on peut faire tendre la température vers zéro à potentiel chimique fixé. En excluant le cas pathologique où l'un des $\epsilon_\alpha - \mu$ s'annule, on peut se placer directement à $T = 0$ et l'on trouve que la loi de Fermi-Dirac se réduit à

$$n_\alpha = 1 \quad \text{si } \epsilon_\alpha < \mu \quad (158)$$

$$n_\alpha = 0 \quad \text{si } \epsilon_\alpha > \mu. \quad (159)$$

On retrouve la notion de mer de Fermi, formée de modes entièrement peuplés, les autres modes étant entièrement vides. La variance du nombre de particules est nulle, donc l'état du système a un nombre fixé de particules $N = \sum_\alpha n_\alpha$. En fait, l'opérateur densité du système est simplement un cas pur, ce cas pur étant un déterminant de Slater ou état de Hartree-Fock :

$$\rho = ||u_0, \dots, u_{N-1}\rangle \langle u_0, \dots, u_{N-1}||, \quad (160)$$

les modes u_α étant numérotés par ordre d'énergie croissante. Une retombée importante de ce résultat déjà bien connu du lecteur est que *le théorème de Wick est applicable quand l'état des fermions est un déterminant de Slater quelconque, y compris le vide*.

Passons au cas des bosons, beaucoup plus complexe. La contrainte $v_\alpha > 0$ impose $\mu < \epsilon_0$, où ϵ_0 est l'énergie du mode fondamental, supposé ici non dégénéré. Faire tendre la température vers zéro à potentiel chimique fixé conduit à $n_\alpha \rightarrow 0$: l'état du système tend vers le vide $|0\rangle$. Le théorème de Wick est donc applicable à un système bosonique dans l'état vide. Cependant, comme l'a remarqué

Einstein en 1925, on obtient une physique plus riche en réduisant la température à nombre moyen de particules fixé. Le point clé est de remarquer alors qu'il existe, à T fixé, une borne supérieure N'_{\max} au nombre total moyen de bosons dans les modes *excités* du système, puisque $\mu < \epsilon_0$:

$$N' \equiv \sum_{\alpha \neq 0} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\alpha - \mu)} - 1} < N'_{\max} \equiv \sum_{\alpha \neq 0} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\alpha - \epsilon_0)} - 1}. \quad (161)$$

Si $\langle \hat{N} \rangle > N'_{\max}$, il y a au moins $\langle \hat{N} \rangle - N'_{\max}$ particules en moyenne dans le mode fondamental du système. Le nombre d'occupation n_0 du mode fondamental peut ainsi devenir macroscopique (c'est-à-dire de l'ordre de $\langle \hat{N} \rangle$, avec $\langle \hat{N} \rangle \gg 1$) si $\langle \hat{N} \rangle$ excède notablement N'_{\max} . On dit dans ce cas qu'un condensat de Bose-Einstein s'est formé. Dans cette limite $n_0 \rightarrow +\infty$, le potentiel chimique μ tend vers ϵ_0 par valeurs inférieures, $|\mu - \epsilon_0| \ll \epsilon_1 - \epsilon_0$ et le nombre moyen de particules dans les modes excités sature à N'_{\max} . Rappelons qu'à la limite thermodynamique, le phénomène de condensation de Bose-Einstein conduit à une transition de phase en dimension trois.

Cependant, nous nous intéressons ici aux fluctuations du nombre total de particules. Que se passe-t-il en présence d'un condensat, avec $n_0 \approx \langle \hat{N} \rangle$? On trouve que la variance du nombre de particules est énorme, à cause des fluctuations du nombre de particules dans le condensat :

$$\text{Var } \hat{N} \geq n_0^2 \approx \langle \hat{N} \rangle^2. \quad (162)$$

Ces fluctuations sont en fait non physiques : l'ensemble grand canonique est pathologique dans le cas du gaz parfait de bosons condensé et n'est plus équivalent à l'ensemble canonique pour le calcul des *fluctuations*. On peut achever de s'en convaincre en calculant la distribution de probabilité du nombre de particules N_0 dans le condensat dans l'ensemble grand canonique :

$$P(N_0) \propto e^{-\beta(\epsilon_0 - \mu)N_0} \quad (163)$$

qui prédit que la valeur la plus probable est $N_0 = 0$.

Que faire de simple en présence d'un condensat, pour calculer les fluctuations de N_0 ? L'idée immédiate est d'utiliser l'ensemble canonique, en fixant le nombre total de particules à N en valeur exacte et non plus moyenne. Cependant, le théorème de Wick n'est plus applicable et le calcul exact des moments de $a_0^+ a_0$ n'est en général pas faisable analytiquement. On peut toutefois faire l'approximation suivante, excellente pour un condensat bien formé. Écrivons l'opérateur densité dans l'ensemble canonique :

$$\rho = P_N \frac{1}{Z} e^{-\beta \sum_\alpha \epsilon_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha}, \quad (164)$$

où P_N projette sur l'espace à N particules. Éliminons ensuite formellement le mode du condensat, en utilisant

$$a_0^+ a_0 = \hat{N} - \sum_{\alpha \neq 0} a_\alpha^+ a_\alpha. \quad (165)$$

D'abord sous la gaussienne :

$$\rho = P_N \frac{e^{-\beta \epsilon_0 N}}{Z} e^{-\beta \sum_{\alpha \neq 0} (\epsilon_\alpha - \epsilon_0) a_\alpha^+ a_\alpha}; \quad (166)$$

puis, encore plus fort, dans le projecteur P_N :

$$\rho = Y(N - \sum_{\alpha \neq 0} a_\alpha^+ a_\alpha) \frac{e^{-\beta \epsilon_0 N}}{Z} e^{-\beta \sum_{\alpha \neq 0} (\epsilon_\alpha - \epsilon_0) a_\alpha^+ a_\alpha}, \quad (167)$$

où $Y(x) = 1$ pour $x \geq 0$ et $Y(x) = 0$ pour $x < 0$, Y étant la fonction de Heaviside. Vient alors l'approximation : si le condensat est bien peuplé, il est raisonnable de supposer que la probabilité qu'il soit vide est négligeable. On remplace donc la fonction de Heaviside par la constante 1,

$$\rho \simeq \rho' = \frac{1}{Z'} e^{-\beta \sum_{\alpha \neq 0} (\epsilon_\alpha - \epsilon_0) a_\alpha^+ a_\alpha}. \quad (168)$$

On s'est ramené ainsi formellement à un ensemble grand canonique pour les modes excités du système, le mode du condensat étant traité comme un réservoir jamais vide de potentiel chimique ϵ_0 . Le théorème de Wick est applicable, on en déduit une approximation de la variance du nombre de particules dans les modes excités, qui est aussi la variance du nombre de particules dans le condensat puisque le nombre total de particules est fixé :

$$\text{Var}_{\text{can}}(a_0^+ a_0) \simeq \sum_{\alpha \neq 0} n_\alpha (n_\alpha + 1) \Big|_{\mu = \epsilon_0}. \quad (169)$$

Il est intéressant de comparer les différentes prédictions sur un cas exactement soluble, le gaz parfait de bosons à une dimension dans un potentiel harmonique. En appelant ω la pulsation d'oscillation des atomes, on trouve facilement que la probabilité, dans l'ensemble canonique, d'avoir zéro particule dans le mode fondamental est

$$P_{\text{can}}(N_0 = 0) = e^{-\beta N \hbar \omega}. \quad (170)$$

À la limite $N \rightarrow +\infty$, on s'attend donc à commettre une erreur exponentiellement petite en traitant le mode du condensat comme un réservoir jamais vide. En utilisant les résultats de la référence [1], on peut le vérifier sur le nombre d'occupation du premier état excité :

$$n_1^{\text{can}} - n_1^{\text{approx}} = O(N e^{-N \beta \hbar \omega}) \quad (171)$$

où $n_1^{\text{approx}} = 1/(e^{\beta \hbar \omega} - 1)$. Notons que l'ensemble grand canonique commet une « erreur » décroissant beaucoup plus lentement avec N :

$$n_1^{\text{can}} - n_1 \sim \frac{n_1(1 + n_1)}{N}, \quad (172)$$

car $\mu - \epsilon_0$ est d'ordre $1/N$.

3.2 Diagonalisation d'hamiltoniens quadratiques

3.2.1 Motivation et objectif

Un hamiltonien quadratique, du point de vue de la seconde quantification, est une fonction quadratique des opérateurs de création et d'annihilation :

$$H = \sum_{\alpha, \beta} A_{\alpha\beta} a_\alpha^+ a_\beta + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left[B_{\alpha\beta} a_\alpha^+ a_\beta^+ + B_{\alpha\beta}^* a_\beta a_\alpha \right] \quad (173)$$

où les a_α et a_β^+ obéissent aux relations de commutation ou d'anticommutation habituelles. On a pris en compte le caractère hermitien de l'hamiltonien ; B est une matrice quelconque et A est une matrice hermitienne :

$$A_{\alpha\beta} = A_{\beta\alpha}^*. \quad (174)$$

Les hamiltoniens quadratiques forment une classe très importante en pratique car on sait résoudre (au moins formellement) le problème physique correspondant, et ils apparaissent dans beaucoup de méthodes approchées (comme Hartree-Fock, BCS, Bogolioubov, Hartree-Fock-Bogolioubov).

Pourquoi sait-on effectivement résoudre dans ce cas ? Parce que les équations du mouvement des a et a^+ en point de vue de Heisenberg sont des équations *linéaires*. C'est le point essentiel à retenir de cette partie.

De plus, nous allons chercher à écrire les hamiltoniens quadratiques sous la forme canonique la plus simple possible. Dans le cas fermionique, on obtient en général la réduction suivante :

$$H = E_0 + \sum_k \epsilon_k b_k^+ b_k \quad (175)$$

où les énergies des modes propres ϵ_k sont strictement positives et les b_k, b_k^+ satisfont aux relations d'anticommutation habituelles. Dans le cas des bosons, l'équivalent de cette réduction (les b_k, b_k^+ obéissant à des relations de commutation) n'est pas toujours possible, mais nous donnerons une condition suffisante pour qu'elle existe. La forme canonique (175), encore appelée forme *normale* car c'est une somme d'oscillateurs découplés, conduit à une interprétation physique simple : H est l'hamiltonien d'un gaz parfait de « quasi-particules » d'énergies propres ϵ_k , de même statistique quantique que les particules sous-jacentes ; elle est en particulier très utile pour la thermodynamique car elle permet de déterminer la fonction de partition du système.

Remarquons l'absence de termes linéaires dans H . Dans le cas fermionique, nous ne connaissons pas de cas physique où de tels termes pourraient apparaître. Dans le cas bosonique, nous supposons qu'on peut les éliminer en redéfinissant, par translation par des constantes, les opérateurs a et a^+ , ce qui ne change pas les relations de commutation.

3.2.2 Cas des fermions

En faisant anticommuter a_α^+ et a_β^+ dans la somme sur les indices α et β , on constate que seule la partie antisymétrique de la matrice B peut donner une contribution non nulle à H . Nous imposons donc à B d'être antisymétrique :

$$B_{\alpha\beta} = -B_{\beta\alpha}. \quad (176)$$

L'idée clé est d'écrire les équations du mouvement des a et a^+ en point de vue de Heisenberg. On est conduit au calcul des commutateurs suivants :

$$[a_\gamma, a_\alpha^+ a_\beta] = \delta_{\alpha\gamma} a_\beta \quad (177)$$

$$[a_\gamma, a_\alpha^+ a_\beta^+] = \delta_{\alpha\gamma} a_\beta^+ - \delta_{\gamma\beta} a_\alpha^+ \quad (178)$$

$$[a_\gamma, a_\alpha a_\beta] = 0. \quad (179)$$

On arrive ainsi à

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_\gamma = [a_\gamma, H] = \sum_\beta A_{\gamma\beta} a_\beta + \frac{1}{2} \sum_\beta B_{\gamma\beta} a_\beta^+ - \frac{1}{2} \sum_\alpha B_{\alpha\gamma} a_\alpha^+. \quad (180)$$

On constate d'abord que la troisième somme vient doubler la contribution de la deuxième, en remplaçant la variable muette α par β et en utilisant l'antisymétrie de B :

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_\gamma = \sum_\beta A_{\gamma\beta} a_\beta + B_{\gamma\beta} a_\beta^+. \quad (181)$$

On constate ensuite que la matrice B induit un couplage entre les a et les a^+ ; on a donc besoin des équations du mouvement pour les a^+ , obtenues par simple conjugaison hermitienne :

$$-i\hbar \frac{d}{dt} a_\gamma^+ = \sum_\beta A_{\gamma\beta}^* a_\beta^+ + B_{\gamma\beta}^* a_\beta. \quad (182)$$

Afin d'obtenir un unique système linéaire, on prend comme inconnue le vecteur colonne :

$$\vec{X}(t) = \begin{pmatrix} \vec{a}(t) \\ \vec{a}^+(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_1^+(t) \\ a_2^+(t) \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (183)$$

On obtient, en notation par blocs :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \vec{X} = \begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \vec{X} \equiv \mathcal{L} \vec{X}. \quad (184)$$

Notons que, dans cette notation par blocs, la seconde ligne de la matrice \mathcal{L} s'obtient en échangeant les deux colonnes, puis en mettant une conjugaison complexe $*$ et un signe $-$. En utilisant le caractère antisymétrique de B , on peut récrire

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^\dagger & -A^* \end{pmatrix}. \quad (185)$$

Comme A et $-A^*$ sont hermitiens, on constate alors que \mathcal{L} est une matrice *hermitienne* :

$$\mathcal{L}^\dagger = \mathcal{L}. \quad (186)$$

Elle est donc diagonalisable en base orthonormale, avec des valeurs propres réelles.

Après réflexion, on découvre une autre propriété de symétrie de \mathcal{L} :¹

$$\mathcal{L}^* = -\sigma \mathcal{L} \sigma \quad \text{avec} \quad \sigma = \sigma^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (190)$$

Cette propriété (190) permet de classer les vecteurs propres en deux familles, en supposant pour simplifier que \mathcal{L} n'a pas de valeur propre nulle :

- la famille \mathcal{F}_+ , composée des vecteurs propres $\begin{pmatrix} \vec{u}_k \\ \vec{v}_k \end{pmatrix}$ de valeur propre $\epsilon_k > 0$
- la famille \mathcal{F}_- , composée des vecteurs propres $\begin{pmatrix} \vec{v}_k^* \\ \vec{u}_k^* \end{pmatrix}$ de valeur propre $-\epsilon_k > 0$.

On notera la façon dont on a exprimé la famille \mathcal{F}_- en termes de la famille \mathcal{F}_+ . Les valeurs propres de \mathcal{L} se groupent par paires de valeurs opposées. Les vecteurs propres sont normalisés à l'unité, si bien que

$$\vec{u}_k^* \cdot \vec{u}_{k'} + \vec{v}_k^* \cdot \vec{v}_{k'} = \delta_{kk'}. \quad (191)$$

De plus, les vecteurs propres de la famille \mathcal{F}_- sont orthogonaux à tous les vecteurs propres de la famille \mathcal{F}_+ :

$$\vec{v}_k \cdot \vec{u}_{k'} + \vec{u}_k \cdot \vec{v}_{k'} = 0. \quad (192)$$

Décomposons alors le vecteur $\vec{X}(t=0)$ dans la base propre de \mathcal{L} :

$$\begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{a}^+ \end{pmatrix} = \sum_{k \in \mathcal{F}_+} b_k \begin{pmatrix} \vec{u}_k \\ \vec{v}_k \end{pmatrix} + b_k^+ \begin{pmatrix} \vec{v}_k^* \\ \vec{u}_k^* \end{pmatrix}. \quad (193)$$

Comme le vecteur \vec{X} est à composantes opérateurs, les coefficients du développement sont des opérateurs :

$$b_k = \vec{u}_k^* \cdot \vec{a} + \vec{v}_k^* \cdot \vec{a}^+ \quad (194)$$

$$b_k^+ = \vec{v}_k \cdot \vec{a} + \vec{u}_k \cdot \vec{a}^+ = b_k^\dagger. \quad (195)$$

1. Il est instructif de relier cette propriété de symétrie à l'effet d'une transformation de type particule-trou. Si l'on considère a_α comme un opérateur de création d'un trou, c_α^+ , et a_α^+ comme un opérateur d'annihilation d'un trou, c_α , l'hamiltonien H est modifié suivant les relations :

$$a_\alpha^+ a_\beta = c_\alpha c_\beta^+ = -c_\beta^+ c_\alpha + \delta_{\alpha\beta} \quad (187)$$

$$a_\alpha a_\beta = c_\alpha^+ c_\beta^+ = -c_\beta^+ c_\alpha^+ \quad (188)$$

c'est-à-dire que l'hamiltonien quadratique pour les trous s'exprime en termes de matrices A^{trou} et B^{trou} telles que

$$A_{\alpha\beta}^{\text{trou}} = -A_{\alpha\beta}^* \quad \text{et} \quad B_{\alpha\beta}^{\text{trou}} = -B_{\alpha\beta}^* \quad (189)$$

si bien que $\mathcal{L}^{\text{trou}} = -\mathcal{L}^*$. La relation (190) permet de conclure que $\mathcal{L}^{\text{trou}}$ et \mathcal{L} se déduisent par la transformation unitaire σ , qui échange justement les \vec{a} et les \vec{a}^+ .

À partir des relations d'orthonormalité de la base propre de \mathcal{L} , on montre que les b et les b^+ obéissent aux relations d'anticommution habituelles. Plus précisément, à partir du lemme affirmant que $\{\vec{x} \cdot \vec{a}, \vec{y} \cdot \vec{a}^+\} = \vec{x} \cdot \vec{y}$, pour des vecteurs complexes \vec{x} et \vec{y} quelconques, on trouve que

$$\{b_k, b_{k'}\} = \vec{u}_k^* \cdot \vec{v}_{k'}^* + \vec{v}_k^* \cdot \vec{u}_{k'}^* = 0 \quad (196)$$

en vertu de (192). De même,

$$\{b_k, b_{k'}^+\} = \vec{u}_k^* \cdot \vec{u}_{k'}^* + \vec{v}_k^* \cdot \vec{v}_{k'}^* = \delta_{kk'} \quad (197)$$

en vertu de (191). Les b et les b^+ sont en fait les opérateurs d'annihilation et de création dans leurs modes propres des quasi-particules mentionnées après l'équation (175). À l'instant t , on a donc sans surprise $b_k(t) = e^{-i\epsilon_k t/\hbar} b_k(0)$, où $b_k(0)$, noté aussi b_k dans la suite, est simplement l'opérateur en point de vue de Schrödinger.

La dernière étape consiste à mettre l'hamiltonien (173) sous la forme réduite (175). On récrit d'abord l'hamiltonien à l'aide de la matrice \mathcal{L} :

$$H = \frac{1}{2}(\vec{a}^+, \vec{a}) \mathcal{L} \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{a}^+ \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \text{Tr} A. \quad (198)$$

Puis on injecte la décomposition modale (193) :

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{F}_+} [\epsilon_k b_k^+ b_k + (-\epsilon_k) b_k b_k^+] + \frac{1}{2} \text{Tr} A. \quad (199)$$

En utilisant la relation d'anticommution des b et des b^+ , on a

$$H = E_0 + \sum_{k \in \mathcal{F}_+} \epsilon_k b_k^+ b_k, \quad (200)$$

où l'on se souvient bien que la somme est prise sur les vecteurs propres de \mathcal{L} d'énergie positive $\epsilon_k > 0$. La constante E_0 s'interprète donc comme l'énergie de l'état fondamental de H :

$$E_0 = \frac{1}{2} \text{Tr} A - \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{F}_+} \epsilon_k. \quad (201)$$

L'état fondamental de H est simplement le vide des b_k . On peut l'écrire explicitement comme l'action d'un opérateur gaussien en les a et a^+ sur le vide des a_α , voir le livre de Jean-Paul Blaizot et Georges Ripka dans la bibliographie. Tous les états excités de H sont obtenus par l'action d'un nombre arbitraire de b^+ (deux à deux distincts) sur l'état fondamental de H .

En pratique, l'expression (201) est malcommode dans la limite d'un nombre infini de modes : les quantités $\sum_k \epsilon_k$ et $\text{Tr} A$ sont en général individuellement divergentes. Une expression plus utilisable est obtenue en écrivant la décomposition de \mathcal{L} sur sa base propre :

$$\mathcal{L} = \sum_{k \in \mathcal{F}_+} \epsilon_k \begin{pmatrix} |u_k\rangle \\ |v_k\rangle \end{pmatrix} (\langle u_k|, \langle v_k|) + (-\epsilon_k) \begin{pmatrix} |v_k^*\rangle \\ |u_k^*\rangle \end{pmatrix} (\langle v_k^*|, \langle u_k^*|) \quad (202)$$

où l'on utilise la notation de Dirac. En projetant cette relation sur le bloc de la première ligne et de la première colonne, on obtient :

$$A = \sum_{k \in \mathcal{F}_+} \epsilon_k |u_k\rangle \langle u_k| + (-\epsilon_k) |v_k^*\rangle \langle v_k^*| \quad (203)$$

Alors la trace de A vaut

$$\text{Tr } A = \sum_{k \in \mathcal{F}_+} \epsilon_k (\langle u_k | u_k \rangle - \langle v_k | v_k \rangle), \quad (204)$$

et la normalisation des modes de \mathcal{L} à l'unité conduit à

$$E_0 = - \sum_{k \in \mathcal{F}_+} \epsilon_k \langle v_k | v_k \rangle. \quad (205)$$

Il est instructif d'appliquer ce formalisme au cas très simple de l'hamiltonien grand canonique d'un gaz parfait de fermions parfaitement polarisés,

$$H_{GC} = \sum_{\alpha} (\epsilon_{\alpha}^{(0)} - \mu) a_{\alpha}^+ a_{\alpha}, \quad (206)$$

dans le cas d'un potentiel chimique $\mu \neq \epsilon_{\alpha}^{(0)}$, $\forall \alpha$. L'état fondamental de H_{GC} est une mer de Fermi, correspondant à une particule dans chaque état à un corps $|u_{\alpha}^{(0)}\rangle$ d'énergie $\epsilon_{\alpha}^{(0)} < \mu$. Alors

- chaque état propre à un corps d'énergie $\epsilon_{\alpha}^{(0)} > \mu$ donne naissance à un mode propre d'énergie $\epsilon_k = \epsilon_{\alpha}^{(0)} - \mu$, et l'opérateur d'excitation correspondant crée une particule en dehors de la mer de Fermi, dans l'état $|u_{\alpha}^{(0)}\rangle$, si bien que $b_k^+ = a_{\alpha}^+$. On trouve en effet que $|u_k\rangle = |u_{\alpha}^{(0)}\rangle$ et $|v_k\rangle = 0$.
- chaque état propre à un corps d'énergie $\epsilon_{\alpha}^{(0)} < \mu$ donne naissance à un mode propre d'énergie $\epsilon_k = \mu - \epsilon_{\alpha}^{(0)}$, et l'opérateur d'excitation correspondant crée un trou dans la mer de Fermi, c'est-à-dire qu'il annihile une particule dans $|u_{\alpha}^{(0)}\rangle$, si bien que $b_k^+ = a_{\alpha}$. On trouve en effet que $|u_k\rangle = 0$ et $|v_k\rangle = |u_{\alpha}^{(0)}\rangle$.

Dans ce cas simple, le formalisme revient donc à utiliser un langage mixte de particules et de trous. Les relations de dispersion du gaz parfait $\epsilon_{\alpha}^{(0)} - \mu$ et des quasi-particules ϵ_k sont représentées sur la figure 1 dans le cas d'un système homogène spatialement à la limite thermodynamique, auquel cas les fonctions d'onde des états propres à un corps $u_{\alpha}^{(0)}(\mathbf{r})$ sont simplement des ondes planes.

3.2.3 Cas des bosons

La procédure est au début similaire à celle des fermions. On constate d'abord que la partie antisymétrique de la matrice B donne une contribution nulle à l'hamiltonien, car les a^+ commutent. Nous imposons donc à B d'être symétrique :

$$B_{\alpha\beta} = B_{\beta\alpha}. \quad (207)$$

Nous calculons ensuite les équations du mouvement et nous trouvons une matrice \mathcal{L} donnée par :

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \quad (208)$$

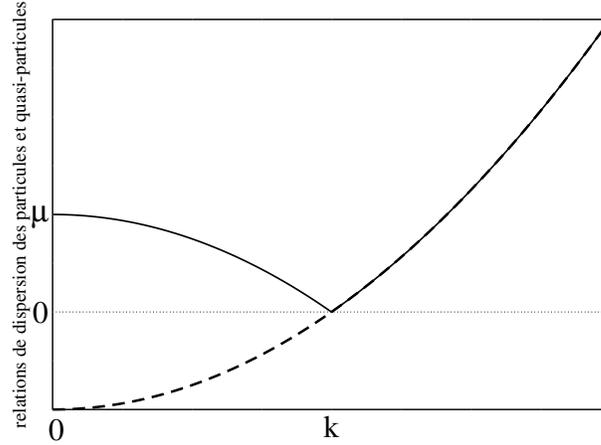


FIGURE 1 – Pour l’hamiltonien grand canonique d’un gaz parfait de fermions spatialement homogène, à la limite thermodynamique, relation de dispersion à un corps $k \rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$ (tireté) et relation de dispersion des quasi-particules $k \rightarrow |\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu|$ (trait plein) en fonction du module du vecteur d’onde des modes propres. La figure est faite dans le cas où le potentiel chimique μ est strictement positif, auquel cas les quasi-particules sont des trous pour $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} < \mu$, et les particules d’origine sinon.

comme pour les fermions.

Cette fois, comme B est symétrique au lieu d’être antisymétrique, on trouve que \mathcal{L} n’est pas hermitienne si $B \neq 0$. On obtient cependant par conjugaison hermitienne la relation simple :

$$\mathcal{L}^\dagger = \eta^{-1} \mathcal{L} \eta \quad \text{avec} \quad \eta = \eta^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (209)$$

On voit donc que \mathcal{L} est « hermitienne » pour un produit scalaire modifié,

$$\langle \vec{X}_1, \vec{X}_2 \rangle = \vec{X}_1^* \cdot \eta \vec{X}_2, \quad (210)$$

c’est-à-dire que $\langle \mathcal{L} \vec{X}_1, \vec{X}_2 \rangle = \langle \vec{X}_1, \mathcal{L} \vec{X}_2 \rangle$, pour tous les vecteurs \vec{X}_1 et \vec{X}_2 . Comme ce produit scalaire est dégénéré (il n’est pas strictement positif), ce caractère pseudo-hermitien ne garantit pas que le spectre de \mathcal{L} soit réel, ni même que \mathcal{L} soit diagonalisable. Considérons néanmoins un vecteur propre de \mathcal{L} avec la valeur propre ϵ_k :

$$\mathcal{L} \begin{pmatrix} \vec{u}_k \\ \vec{v}_k \end{pmatrix} = \epsilon_k \begin{pmatrix} \vec{u}_k \\ \vec{v}_k \end{pmatrix}. \quad (211)$$

Alors

$$\mathcal{L}^\dagger \begin{pmatrix} \vec{u}_k \\ -\vec{v}_k \end{pmatrix} = \epsilon_k \begin{pmatrix} \vec{u}_k \\ -\vec{v}_k \end{pmatrix}. \quad (212)$$

Ceci implique que ϵ_k^* est une valeur propre de \mathcal{L} car

$$\det(\mathcal{L} - \epsilon_k^* \text{Id}) = [\det(\mathcal{L}^\dagger - \epsilon_k \text{Id})]^* = 0 \quad (213)$$

où Id est la matrice identité.

Par ailleurs, la propriété (190) reste vraie pour les bosons :

$$\mathcal{L}^* = -\sigma \mathcal{L} \sigma \quad \text{avec} \quad \sigma = \sigma^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (214)$$

On trouve alors que

$$\mathcal{L} \begin{pmatrix} \vec{v}_k^* \\ \vec{u}_k^* \end{pmatrix} = -\epsilon_k^* \begin{pmatrix} \vec{v}_k^* \\ \vec{u}_k^* \end{pmatrix}, \quad (215)$$

c'est-à-dire que $-\epsilon_k^*$ est valeur propre de \mathcal{L} . En combinant ceci avec la propriété précédente, on trouve que $\epsilon_k, \epsilon_k^*, -\epsilon_k, -\epsilon_k^*$ sont simultanément valeurs propres.

Notons que ces propriétés n'ont rien de spécifiquement quantique, et sont bien connues en mécanique hamiltonienne classique [2]. Il est en fait possible, dans le présent cas des bosons, d'associer à l'hamiltonien quantique un hamiltonien classique en remplaçant les opérateurs \hat{a}_α et \hat{a}_β^+ par des variables classiques a_α et a_β^* qui sont de simples nombres complexes avec des crochets de Poisson $\{a_\alpha, a_\beta^*\}_{\text{Pois}} = \delta_{\alpha\beta}/(i\hbar)$ et $\{a_\alpha, a_\beta\}_{\text{Pois}} = \{a_\alpha^*, a_\beta^*\}_{\text{Pois}} = 0$, le facteur $i\hbar$ venant du fait que, quantiquement, la dérivée temporelle est un commutateur divisée par $i\hbar$, alors que, dans la théorie hamiltonienne classique, la dérivée temporelle est un crochet de Poisson :

$$\frac{df}{dt} = \partial_t f + \{f, H_{\text{clas}}\}_{\text{Pois}}. \quad (216)$$

La matrice des équations linéaires obtenues pour ces variables classiques est exactement la matrice \mathcal{L} . C'est un des avantages de la seconde quantification de permettre la construction d'un modèle de champ classique pour les bosons, souvent utile pour comprendre le comportement du champ quantique. On s'attend même à ce qu'un tel modèle de champ classique soit une bonne approximation de l'évolution du système quantique si l'on se limite aux modes fortement peuplés, l'évolution de ces modes étant alors due essentiellement aux effets stimulés (pris en compte classiquement), qui l'emportent sur les effets spontanés (absent de la théorie classique). Ce modèle, soluble numériquement, a ainsi été utilisé pour étudier la turbulence d'un superfluide, ou certaines propriétés d'un gaz de bosons à température assez élevée (plus élevée que l'énergie typique d'interaction par particules).

Nous allons maintenant voir sur trois exemples à un mode qu'il ne faut pas espérer en général pouvoir écrire H comme dans (175) sous la forme $E_0 + \sum_k \epsilon_k b_k^+ b_k$, avec $\epsilon_k > 0$.

Exemple 1 :

$$H = \frac{1}{2} \hbar \gamma (a^{+2} + a^2) \quad (217)$$

où $\gamma > 0$. Les matrices 1×1 A et B valent respectivement 0 et $\hbar \gamma$ si bien que

$$\mathcal{L} = \hbar \gamma \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (218)$$

de valeurs propres $\pm i\hbar\gamma$. On trouve donc qu'une quadrature du champ (pour adopter le langage de l'optique quantique) croît en $e^{\gamma t}$ alors que l'autre quadrature décroît en $e^{-\gamma t}$. On dit que le système est *instable dynamiquement*.

L'hamiltonien considéré apparaît effectivement en optique quantique dans des matériaux non linéaires (avec génération d'harmonique double, due à une non-linéarité de type $\chi^{(2)}$), et l'évolution temporelle correspondante produit, à partir du vide ou d'un état cohérent de Glauber, des états comprimés du champ dont une des quadratures fluctue moins que dans le vide. Pour le voir, on peut poser $a = x + iy$, où x et y sont hermitiens; dans le cas classique, x et y sont simplement la partie réelle et la partie imaginaire de l'amplitude du champ. On a alors

$$\frac{d}{dt}x = -\gamma y \quad (219)$$

$$\frac{d}{dt}y = -\gamma x \quad (220)$$

si bien que, selon la direction (1,1) dans le plan xOy , l'amplitude du champ décroît exponentiellement, alors qu'elle croît exponentiellement selon la direction (1, -1). Si l'on part du vide du champ, dont la distribution de Wigner est une gaussienne isotrope, on trouve donc que la distribution de Wigner aux temps ultérieurs est une gaussienne qui se rétrécit selon la bissectrice intérieure et qui s'étire selon la bissectrice extérieure (voir la figure 2).

On peut, dans le présent cas d'instabilité dynamique à un mode, introduire une forme réduite suggestive de l'hamiltonien en normalisant convenablement les opérateurs x et y à l'aide d'une masse fictive m :

$$P = \left(\frac{\hbar m \gamma}{2}\right)^{1/2} (a + a^\dagger) \quad (221)$$

$$Q = \left(\frac{\hbar}{2m\gamma}\right)^{1/2} i(a - a^\dagger) \quad (222)$$

si bien que les opérateurs hermitiens P et Q représentent l'opérateur impulsion et l'opérateur position d'une particule fictive à une dimension, avec la relation de commutation habituelle $[P, Q] = -i\hbar$. L'hamiltonien s'écrit alors simplement

$$H = \frac{P^2}{2m} - \frac{1}{2}m\gamma^2 Q^2 \quad (223)$$

ce qui correspond à une particule dans un potentiel harmonique expulsant, cas manifeste d'instabilité dynamique.

Exemple 2 :

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega \left[a^\dagger a - \frac{1}{2}a^{+2} - \frac{1}{2}a^2 \right] \quad (224)$$

où $\omega > 0$. Alors $A = \hbar\omega/2$ et $B = -\hbar\omega/2$ si bien que

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (225)$$

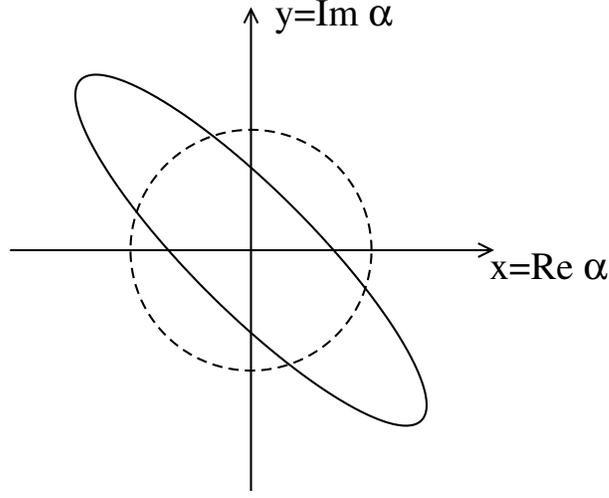


FIGURE 2 – Évolution de l’amplitude d’un champ bosonique obéissant à l’hamiltonien (217). Initialement, le champ est dans l’état vide ($a|0\rangle = 0$) si bien que la distribution de Wigner $W(\alpha)$ de l’état du champ est une gaussienne isotrope, dont tout isocontour dans le plan complexe est circulaire (tireté). Après évolution, la distribution de Wigner est une gaussienne anisotrope, dont tout isocontour est une ellipse d’axe court selon la bissectrice $x = y$ et d’axe long selon $x = -y$ (trait plein). On obtient ainsi un état dit « vide comprimé », avec des fluctuations d’amplitude du champ minimales pour la quadrature $(x + y)/\sqrt{2}$ et réduites par rapport au vide d’un facteur $e^{\gamma t}$.

Cette matrice n’est pas diagonalisable car toutes les racines de son polynôme caractéristique sont nulles alors que \mathcal{L} n’est pas nulle. En clair, on trouve - à un facteur de normalisation près - un seul vecteur propre de valeur propre nulle. L’opérateur d’évolution associé à \mathcal{L} diverge linéairement en temps, car $\mathcal{L}^2 = 0$:

$$e^{-i\mathcal{L}t/\hbar} = 1 - i\mathcal{L}t/\hbar. \tag{226}$$

Par un changement de base bien choisi, on peut mettre \mathcal{L} sous la forme de Jordan $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Ce qui revient à introduire les opérateurs hermitiens :

$$P = \left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{1/2} \frac{a - a^+}{i} \tag{227}$$

$$Q = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} (a + a^+), \tag{228}$$

qui obéissent à la relation de commutation $[P, Q] = -i\hbar$, la masse m étant ici fictive. On constate alors que

$$H = \frac{P^2}{2m} - \frac{\hbar\omega}{4} \tag{229}$$

c'est-à-dire que le champ se comporte comme une particule libre de position Q et d'impulsion P , et non pas comme un oscillateur harmonique. La variable Q croît linéairement en temps, alors que P est une constante du mouvement.

Exemple 3 :

$$H = -\hbar\omega a^+ a \quad (230)$$

où $\omega > 0$. Le spectre est non borné inférieurement. Si le système est isolé, rien de spécial n'apparaît, a et a^+ oscillant à la pulsation ω . Ceci est bien clair dans le jeu de variables (227,228) où l'hamiltonien vaut simplement

$$H = - \left[\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 Q^2 - \frac{\hbar\omega}{2} \right] \quad (231)$$

Si l'on couple le système à un thermostat, on trouve cependant qu'aucun équilibre thermodynamique ne peut être atteint, car l'opérateur densité $e^{-\beta H}$ est de trace infinie. En réalité, dans le cas d'un tel couplage, le système cède de l'énergie au thermostat et gagne des états de plus en plus excités du champ : l'amplitude a devient tellement grande que l'approximation d'un hamiltonien quadratique s'effondre, et les non-linéarités du « vrai » hamiltonien entrent en jeu. On dit que le système est *instable thermodynamiquement*.

Nous allons nous restreindre désormais à un cas simple, mais utile en pratique, exempt d'instabilité dynamique ou thermodynamique. Pour définir ce cadre simple, exprimons l'hamiltonien (173) à l'aide de la matrice \mathcal{L} :

$$H = \frac{1}{2} (a^+, \bar{a}) \eta \mathcal{L} \begin{pmatrix} \bar{a} \\ a^+ \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \text{Tr} A. \quad (232)$$

On voit cette fois, contrairement aux fermions, que c'est la matrice $\eta \mathcal{L}$ qui apparaît. D'après la relation (209), cette matrice est hermitienne. Il est alors intuitif que tout se passe bien si

$$\eta \mathcal{L} > 0, \quad (233)$$

condition de stricte positivité que nous supposerons vérifiée dans la suite. Montrons alors que les valeurs propres de \mathcal{L} sont réelles. Multiplions à gauche l'équation (211) par la matrice η puis faisons le produit scalaire avec le vecteur propre lui-même :

$$(\vec{u}_k^*, \vec{v}_k^*) \eta \mathcal{L} \begin{pmatrix} \vec{u}_k \\ \vec{v}_k \end{pmatrix} = \epsilon_k [\langle u_k | u_k \rangle - \langle v_k | v_k \rangle]. \quad (234)$$

Le premier membre étant strictement positif, on trouve que $\langle u_k | u_k \rangle - \langle v_k | v_k \rangle$ est non nul et l'on peut diviser l'égalité par cette quantité. On trouve qu' ϵ_k est le rapport de deux quantités réelles donc ϵ_k est réel. Ceci élimine toute possibilité d'instabilité dynamique. On constate aussi que $\langle u_k | u_k \rangle - \langle v_k | v_k \rangle$ et ϵ_k sont de même signe : nous allons voir que ceci exclut l'instabilité thermodynamique.

Rappel sur la diagonalisation d'une matrice M quelconque. Soit une matrice M diagonalisable. On peut l'écrire sous la forme :

$$M = \sum_k m_k |\psi_k^d\rangle \langle \psi_k^g| \quad (235)$$

où l'on a introduit ses vecteurs propres à droite $|\psi_k^d\rangle$ et ses vecteurs propres à gauche $\langle\psi_k^g|$:

$$M|\psi_k^d\rangle = m_k|\psi_k^d\rangle \quad (236)$$

$$\langle\psi_k^g|M = m_k\langle\psi_k^g| \quad (237)$$

normalisés de façon que

$$\langle\psi_k^g|\psi_{k'}^d\rangle = \delta_{kk'}. \quad (238)$$

On a aussi la décomposition de l'identité :

$$\text{Id} = \sum_k |\psi_k^d\rangle\langle\psi_k^g|. \quad (239)$$

On dit que la base $\{|\psi_k^g\rangle\}$ est adjointe à la base des vecteurs propres à droite. En prenant l'hermitien conjugué de (237), on constate que cette base adjointe est simplement formée des vecteurs propres de l'hermitien conjugué de M :

$$M^\dagger|\psi_k^g\rangle = m_k^*|\psi_k^g\rangle. \quad (240)$$

Appliquons ce rappel à la mise de l'hamiltonien sous forme canonique, en prenant $M = \mathcal{L}$. Comme le spectre de \mathcal{L} est réel, la propriété (215) permet de grouper les vecteurs propres de \mathcal{L} en deux familles :

- la famille \mathcal{F}_+ , composée des vecteurs propres $\begin{pmatrix} \vec{u}_k \\ \vec{v}_k \end{pmatrix}$ de « norme modifiée au carré » $\langle u_k|u_k\rangle - \langle v_k|v_k\rangle = 1$. Les valeurs propres associées ϵ_k sont > 0 . Les vecteurs adjoints correspondants sont $\begin{pmatrix} \vec{u}_k \\ -\vec{v}_k \end{pmatrix}$, en vertu de (212).
- la famille \mathcal{F}_- , composée des vecteurs propres $\begin{pmatrix} \vec{v}_k^* \\ \vec{u}_k^* \end{pmatrix}$, de « norme modifiée au carré » égale à -1 , de valeur propre $-\epsilon_k < 0$ et de vecteur adjoint $\begin{pmatrix} -\vec{v}_k^* \\ \vec{u}_k^* \end{pmatrix}$.

On effectue alors la décomposition modale

$$\begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{a}^+ \end{pmatrix} = \sum_{k \in \mathcal{F}_+} b_k \begin{pmatrix} \vec{u}_k \\ \vec{v}_k \end{pmatrix} + b_k^+ \begin{pmatrix} \vec{v}_k^* \\ \vec{u}_k^* \end{pmatrix}, \quad (241)$$

où les coefficients du développement sont les opérateurs obtenus par produit scalaire avec les vecteurs adjoints :

$$b_k = \vec{u}_k^* \cdot \vec{a} - \vec{v}_k^* \cdot \vec{a}^+ \quad (242)$$

$$b_k^+ = -\vec{v}_k \cdot \vec{a} + \vec{u}_k \cdot \vec{a}^+ = b_k^\dagger. \quad (243)$$

À partir des relations (238) entre la base propre de \mathcal{L} et la base adjointe, on montre que les b et les b^+ obéissent aux relations de commutation habituelles :

$$[b_k, b_{k'}] = 0 \quad \text{et} \quad [b_k, b_{k'}^+] = \delta_{kk'}. \quad (244)$$

Finalement, en injectant la décomposition modale dans (232) et en utilisant la même astuce pour éliminer la trace de A que dans le cas des fermions, on aboutit à

$$H = E_0 + \sum_{k \in \mathcal{F}_+} \epsilon_k b_k^+ b_k \quad (245)$$

où les ϵ_k sont tous réels strictement positifs et l'énergie de l'état fondamental (qui est le vide des b_k) s'écrit

$$E_0 = - \sum_{k \in \mathcal{F}_+} \epsilon_k \langle \nu_k | \nu_k \rangle. \quad (246)$$

Les états excités du système s'obtiennent par action d'un nombre arbitraire de b_k^+ sur le vide.

3.3 Méthode de Bogolioubov

Sur l'exemple d'un gaz de bosons sans spin et en interaction dans le régime d'un condensat presque pur, nous justifions soigneusement l'obtention d'un hamiltonien quadratique, l'hamiltonien de Bogolioubov, constituant une approximation contrôlée de l'hamiltonien complet.

3.3.1 Régime considéré et hamiltonien modèle

Le régime d'un condensat presque pur est atteint à basse température, bien inférieure à la température de transition T_c , et pour des interactions assez faibles. L'hélium 4 liquide n'est pas dans ce régime : les interactions sont très fortes, la distance entre les particules étant de l'ordre de grandeur de la portée du potentiel d'interaction; on pense actuellement que la fraction condensée est $< 10\%$ même à température nulle. Les gaz atomiques, que l'on sait condenser de Bose depuis 1995, sont beaucoup moins denses, beaucoup plus raréfiés (la distance moyenne entre particules est très supérieure à la portée du potentiel d'interaction) et peuvent avoir une fraction condensée supérieure à 80%.

Dans ces gaz condensés, la température n'est pas supérieure au microkelvin si bien que les longueurs d'onde de de Broglie relatives des particules sont au moins de l'ordre d'une fraction de micron, donc très supérieures à la portée du potentiel (plus précisément à la longueur de van der Waals), elle-même de l'ordre de quelques nanomètres. On admet alors que l'interaction peut être caractérisée par un seul paramètre, la longueur de diffusion a , et que l'on peut d'une certaine façon remplacer le vrai potentiel d'interaction par un potentiel effectif de basse énergie :

$$V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = g \delta^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad \text{avec} \quad g = \frac{4\pi \hbar^2 a}{m} \quad (247)$$

où $\delta^3(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z)$ est la distribution de Dirac en dimension trois, m est la masse d'une particule, et g est appelée la constante de couplage. Le lecteur qui souhaite avoir plus de détails est renvoyé à la section 4.5.2, où la longueur a est définie, et à la section 3.3.9, qui remédie à la divergence de l'énergie déclenchée à l'ordre de Bogolioubov par le choix (247).

Notre hamiltonien modèle s'écrit en seconde quantification :

$$H = \int d^3 r \left[\hat{\psi}^\dagger h_1 \hat{\psi} + \frac{g}{2} \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi} \right], \quad (248)$$

où h_1 est l'opérateur différentiel représentant l'hamiltonien à un corps en représentation position :

$$h_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r}), \quad (249)$$

$U(\mathbf{r})$ étant un potentiel de piégeage (essentiellement harmonique dans les expériences).

Dans la suite, nous nous placerons dans l'ensemble **canonique**. En effet, notre théorie doit s'appliquer aussi au gaz parfait condensé de Bose, pour lequel l'ensemble grand canonique n'est pas acceptable à cause de ses fluctuations géantes.

3.3.2 Idée générale de la méthode de Bogolioubov

Si un condensat est présent, l'un des modes $\phi(\mathbf{r})$ du champ bosonique, appelé fonction d'onde du condensat et normalisé à l'unité, est macroscopiquement peuplé. On introduit donc la décomposition :

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) a_\phi + \hat{\psi}_\perp(\mathbf{r}) \quad (250)$$

où a_ϕ annihile une particule dans l'état ϕ :

$$a_\phi = \int d^3 r \phi^*(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}). \quad (251)$$

La notation avec l'indice \perp est justifiée par le fait que le champ $\hat{\psi}_\perp(\mathbf{r})$ est orthogonal à la fonction d'onde du condensat :

$$\int d^3 r \phi^*(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\perp(\mathbf{r}) = 0 \quad (252)$$

comme on peut le vérifier par substitution directe à partir de (250). De plus, en utilisant

$$[a_\phi, \psi^\dagger(\mathbf{r})] = \langle \phi | \mathbf{r} \rangle = \phi^*(\mathbf{r}), \quad (253)$$

on trouve les relations de commutation suivantes pour $\hat{\psi}_\perp$:

$$[\hat{\psi}_\perp(\mathbf{r}), \hat{\psi}_\perp^\dagger(\mathbf{r}')] = \langle \mathbf{r} | Q | \mathbf{r}' \rangle \quad (254)$$

où l'opérateur à une particule Q projette orthogonalement à la fonction d'onde du condensat :

$$Q = 1 - |\phi\rangle\langle\phi|. \quad (255)$$

Le champ $\hat{\psi}_\perp$ est donc exactement l'opérateur de champ restreint aux modes orthogonaux à ϕ :

$$\hat{\psi}_\perp^\dagger(\mathbf{r}) = a_{Q|\mathbf{r}}^+. \quad (256)$$

Une dernière relation utile est l'expression de l'opérateur nombre total de particules :

$$\hat{N} = a_\phi^\dagger a_\phi + \int d^3 r \hat{\psi}_\perp^\dagger \hat{\psi}_\perp. \quad (257)$$

L'idée géniale de Bogolioubov est d'exploiter le fait que, dans les états à N corps peuplés à basse température, $\hat{\psi}_\perp$ est *petit* par rapport à ϕa_ϕ . Que signifie *petit* ici? Ces deux opérateurs sont de moyenne nulle, on compare donc leurs « normes au carré » :

$$\int d^3 r \langle \hat{\psi}_\perp^\dagger \hat{\psi}_\perp \rangle \ll \int d^3 r \phi^* \phi \langle a_\phi^\dagger a_\phi \rangle = \langle a_\phi^\dagger a_\phi \rangle, \quad (258)$$

où la moyenne est prise dans l'état physique du système. L'interprétation est simple : le membre de gauche est le nombre moyen de particules non condensées (c'est-à-dire dans des modes orthogonaux à ϕ), alors que le membre de droite est le nombre moyen de particules dans le condensat. La condition (258) exprime alors que le gaz est un condensat presque pur.

Il reste à développer l'hamiltonien en puissances de $\hat{\psi}_\perp$. Dans la méthode de Bogolioubov, on s'arrête à l'ordre 2, d'où l'obtention d'un hamiltonien quadratique. Comme le nombre total N de bosons est fixé, $a_\phi^\dagger a_\phi$ dépend de $\hat{\psi}_\perp$ au second ordre : c'est essentiellement le seul « piège » à éviter.

3.3.3 Développement à l'ordre zéro : l'équation de Gross-Pitayevski

À l'ordre zéro, on néglige totalement $\hat{\psi}_\perp$. On remplace donc $\hat{\psi}$ par ϕa_ϕ dans l'hamiltonien. Il apparaît $a_\phi^\dagger a_\phi$ que l'on peut remplacer à l'ordre zéro par N , ce qui conduit à l'hamiltonien d'ordre zéro :

$$H_0 = N \int d^3 r \left[\phi^* h_1 \phi + \frac{g}{2} (N-1) |\phi|^4 \right] = E[\phi, N] \quad (259)$$

où l'on négligera dans la fonctionnelle $E[\phi, N]$ le -1 dans $N-1$.

La fonction d'onde du condensat est obtenue en minimisant la fonctionnelle énergie $E[\phi, N]$ sur ϕ avec la contrainte que ϕ est normalisée à l'unité. Une astuce est de minimiser

$$E[\phi, N] = N \int d^3 r \left[\frac{\phi^* h_1 \phi}{\|\phi\|^2} + \frac{g}{2} N \frac{|\phi|^4}{\|\phi\|^4} \right] \quad (260)$$

sans contrainte sur la norme $\|\phi\|$. Une condition nécessaire pour avoir un minimum est que les dérivées fonctionnelles premières par rapport à ϕ et ϕ^* sont nulles,

$$\frac{\delta E}{\delta \phi} = \frac{\delta E}{\delta \phi^*} = 0 \quad (261)$$

ce qui conduit à la fameuse équation de Gross-Pitayevski :

$$h_1 \phi + g N |\phi|^2 \phi = \mu \phi \quad (262)$$

avec

$$\mu = \int d^3 r \left[\phi^* h_1 \phi + g N |\phi|^4 \right]. \quad (263)$$

Attention, μ n'est pas l'énergie par particule mais le potentiel chimique :

$$\frac{d}{dN}E[\phi_N, N] = \partial_N E[\phi_N, N] + \int d^3r \left(\partial_N \phi_N \frac{\delta E}{\delta \phi} + \partial_N \phi_N^* \frac{\delta E}{\delta \phi^*} \right) = \partial_N E[\phi_N, N] = \mu, \quad (264)$$

où l'on met en évidence ici, par la notation ϕ_N , la dépendance en N de la solution de l'équation de Gross-Pitayevski indépendante du temps. On peut aussi extrémaliser sous contrainte, sans utiliser l'astuce, avec la méthode de Lagrange, auquel cas μ est proportionnel au multiplicateur de Lagrange.

On notera le terme de champ moyen, $gN|\phi(\mathbf{r})|^2$, qui vient s'ajouter au potentiel de piégeage $U(\mathbf{r})$ et fait de l'équation de Gross-Pitayevski une équation de Schrödinger non linéaire. Son effet sur la fonction d'onde du condensat est spectaculaire dans un système de grande taille. Considérons en effet un gaz libre dans le plan yOz et confiné selon l'axe Ox par deux murs infinis, l'un en $x = 0$ et l'autre en $x = L$, qui imposent donc que la fonction d'onde du condensat s'annule en ces points. Dans le cas du gaz parfait, la fonction d'onde « macroscopique » $N^{1/2}\phi(x)$ est proportionnelle à $\sin(\pi x/L)$, elle est donc fortement perturbée partout par la présence des murs (par rapport au cas de conditions aux limites périodiques pour lesquelles ϕ est constante). En présence d'une interaction répulsive ($g > 0$), l'équation de Gross-Pitayevski prédit, dans la limite $L \rightarrow +\infty$, que $N^{1/2}\phi(x)$ est essentiellement constante partout et égale à $\rho^{1/2}$, où ρ est la densité du gaz, sauf dans une région de distance aux murs au plus de l'ordre de ξ , ξ étant la longueur de relaxation définie ici par

$$\frac{\hbar^2}{m\xi^2} = \rho g. \quad (265)$$

Plus précisément, dans la limite $L/\xi \rightarrow +\infty$ à x/ξ fixé, l'équation de Gross-Pitayevski donne

$$N^{1/2}\phi(x) = \rho^{1/2} \text{th} \frac{x}{\xi}. \quad (266)$$

Ceci est illustré sur la figure 3. Retenons aussi que l'équation de Gross-Pitayevski se généralise au cas dépendant du temps, ce qui revient à remplacer $\mu\phi$ par $i\hbar\partial_t\phi$.

En conclusion, l'équation de Gross-Pitayevski permet de calculer la fonction d'onde du condensat à l'ordre zéro en la fraction non condensée, ce qui souvent suffit pour rendre compte des résultats expérimentaux sur les condensats gazeux.

3.3.4 Développement à l'ordre un

À l'ordre un, il suffit d'injecter la décomposition (250) dans l'hamiltonien et de garder les termes linéaires en $\hat{\psi}_\perp$:

$$H_1 = \int \phi^* a_\phi^\dagger h_1 \hat{\psi}_\perp + g|\phi|^2 \phi^* a_\phi^\dagger a_\phi^\dagger a_\phi \hat{\psi}_\perp + \text{h.c.} . \quad (267)$$

En négligeant 1 devant N et en remplaçant $a_\phi^\dagger a_\phi$ par N , on se ramène à

$$H_1 = \int \phi^* [h_1 + Ng|\phi|^2] a_\phi^\dagger \hat{\psi}_\perp + \text{h.c.} . \quad (268)$$

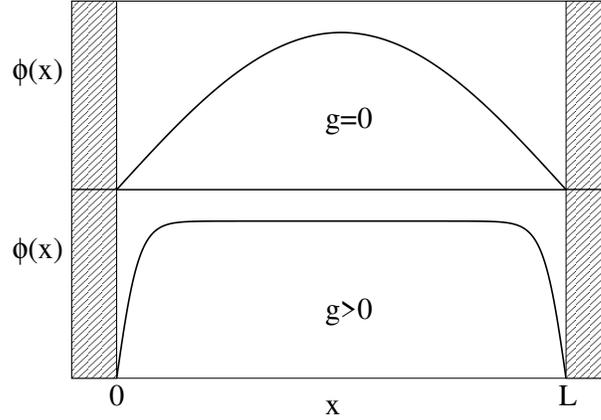


FIGURE 3 – Pour un gaz confiné selon Ox entre deux murs de potentiel infinis, placés en $x = 0$ et $x = L$, et de densité uniforme dans le plan yOz , fonction d'onde du condensat pour le gaz parfait ($g = 0$) et pour le cas d'une interaction répulsive ($g > 0$), d'après l'équation de Gross-Pitayevski. Ceci illustre la sensibilité pathologique du condensat du gaz parfait à la forme du « récipient », et son insensibilité dans le cas avec interaction [sauf à une distance des parois au plus d'ordre ξ , où ξ est la longueur de relaxation donnée par l'équation (265) et prise $\ll L$ sur la figure].

Comme $h_1 + Ng|\phi|^2$ est hermitien, on peut le faire agir à gauche sur ϕ^* . Le résultat est $\mu\phi^*$ puisque ϕ est solution de l'équation de Gross-Pitayevski. Or ϕ est orthogonal à $\hat{\psi}_\perp$, comme on l'a vu, si bien que

$$H_1 = 0. \quad (269)$$

Voilà pourquoi Bogolioubov est allé à l'ordre deux.

3.3.5 Développement à l'ordre deux

L'erreur à ne pas faire serait d'oublier que \hat{N} et $a_\phi^\dagger a_\phi$ ne coïncident plus à l'ordre deux. Une première contribution $H_2^{n_\phi}$ à H_2 est donc obtenue en remplaçant N par $N - \hat{N}_\perp$ dans l'expression (259) de H_0 , où \hat{N}_\perp est l'opérateur nombre de particules non condensées. En utilisant l'expression (263) du potentiel chimique, on arrive ainsi à

$$H_2^{n_\phi} = -\mu\hat{N}_\perp. \quad (270)$$

Un argument très direct est de dire que $H_2^{n_\phi}$ s'obtient par développement au premier ordre en \hat{N}_\perp de

$$H_0(N - \hat{N}_\perp) - H_0(N) \simeq -\hat{N}_\perp \frac{d}{dN} H_0(N) = -\mu\hat{N}_\perp. \quad (271)$$

Ceci est exactement le terme qu'on aurait si les particules non condensées étaient considérées dans un ensemble grand canonique! Ce résultat est remarquable car il montre que le mode du condensat se comporte comme un réservoir de potentiel chimique μ vis-à-vis des modes non condensés. Nous avons déjà obtenu ce résultat dans le cas du gaz parfait, voir l'équation (168).

La deuxième contribution à H_2 s'obtient, sans surprise, en injectant la décomposition de $\hat{\psi}$ dans H et en gardant les termes quadratiques en $\hat{\psi}_\perp$:

$$H_2^{\psi_\perp} = \int \hat{\psi}_\perp^\dagger h_1 \hat{\psi}_\perp + \frac{g}{2} \int \left[\left(\hat{\psi}_\perp^{\dagger 2} \phi^2 a_\phi^2 + \text{h.c.} \right) + 4|\phi|^2 a_\phi^+ a_\phi \hat{\psi}_\perp^\dagger \hat{\psi}_\perp \right]. \quad (272)$$

Dans le dernier terme du second membre, on peut remplacer $a_\phi^+ a_\phi$ par N . Par contre, dans le deuxième terme, on ne voit pas comment éliminer a_ϕ^2 , ce qui est crucial si l'on veut obtenir un hamiltonien quadratique. Bogolioubov s'en est sorti de façon non rigoureuse en remplaçant a_ϕ par un nombre complexe, mais il est possible d'être plus soigneux.

3.3.6 Élimination du mode du condensat et résultat final

Pour aboutir à un hamiltonien quadratique, nous introduisons la représentation exacte suivante de a_ϕ :

$$a_\phi = A_\phi \sqrt{n_\phi} \quad (273)$$

avec $n_\phi = a_\phi^+ a_\phi$ et

$$A_\phi = \frac{1}{\sqrt{n_\phi + 1}} a_\phi. \quad (274)$$

Dans la base de Fock du mode du condensat, on trouve que

$$A_\phi |n : \phi\rangle = |n-1 : \phi\rangle \text{ si } n > 0 \quad (275)$$

$$= 0 \text{ sinon.} \quad (276)$$

On constate alors que l'opérateur A_ϕ est « presque » unitaire :

$$A_\phi A_\phi^\dagger = 1 \quad (277)$$

$$A_\phi^\dagger A_\phi = 1 - |0 : \phi\rangle \langle 0 : \phi| \quad (278)$$

Dans le régime d'un condensat presque pur considéré ici, on peut supposer que la probabilité que le mode du condensat soit vide est négligeable, comme nous l'avons fait pour le gaz parfait dans la section 3.1.5. On peut alors supposer que A_ϕ est unitaire,

$$A_\phi^\dagger A_\phi \simeq A_\phi A_\phi^\dagger = 1. \quad (279)$$

Une notation courante, dans ce cadre approché, introduit un opérateur hermitien $\hat{\theta}$, appelé opérateur phase du condensat,

$$A_\phi \simeq e^{i\hat{\theta}}. \quad (280)$$

On peut alors achever l'élimination du mode du condensat en introduisant le champ

$$\hat{\Lambda}(\mathbf{r}) \equiv A_\phi^\dagger \hat{\psi}_\perp(\mathbf{r}), \quad (281)$$

relation qui s'inverse en

$$\hat{\psi}_\perp(\mathbf{r}) = A_\phi \hat{\Lambda}(\mathbf{r}). \quad (282)$$

Le champ $\hat{\Lambda}$ conserve le nombre total de particules, puisque la particule enlevée par $\hat{\psi}_\perp$ dans les modes orthogonaux à ϕ est transférée dans le mode du condensat. À part cela, ce champ ressemble beaucoup à $\hat{\psi}_\perp$, dans l'approximation (279) :

$$[\hat{\Lambda}(\mathbf{r}), \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}')] \simeq \langle \mathbf{r}|Q|\mathbf{r}' \rangle \quad (283)$$

$$\int d^3r \hat{\Lambda}^\dagger \hat{\Lambda} = \int d^3r \hat{\psi}_\perp^\dagger A_\phi A_\phi^\dagger \hat{\psi}_\perp = \int d^3r \hat{\psi}_\perp^\dagger \hat{\psi}_\perp = \hat{N}_\perp. \quad (284)$$

On aboutit ainsi à la forme finale de l'hamiltonien de Bogolioubov,

$$H_2 \simeq H_{\text{Bog}} = E[\phi, N] + \int d^3r \left[\hat{\Lambda}^\dagger (h_1 - \mu) \hat{\Lambda} + 2gN|\phi|^2 \hat{\Lambda}^\dagger \hat{\Lambda} + \frac{gN}{2} (\phi^2 \hat{\Lambda}^{\dagger 2} + \phi^{*2} \hat{\Lambda}^2) \right]. \quad (285)$$

C'est bien un hamiltonien quadratique. Donnons une interprétation physique des termes non triviaux :

- le deuxième terme sous l'intégrale, en $\hat{\Lambda}^\dagger \hat{\Lambda}$, correspond à la diffusion d'une particule non condensée sur une particule du condensat, suivant la réaction



On obtient ce terme dans une théorie de champ moyen très simple, la théorie de Hartree-Fock. Le point intéressant est que le potentiel de champ moyen correspondant, cette fois pour les particules non condensées, est $2gN|\phi|^2$, c'est exactement le double du potentiel de champ moyen vu par une particule du condensat. Le facteur 2 est dû au fait que les particules non condensées sont dans un mode *différent* de celui des particules qui créent le champ, c'est-à-dire les particules du condensat. Mathématiquement, c'est exactement relié au fait que le vecteur d'état (38) comporte deux termes avec un facteur de normalisation $1/\sqrt{2}$ alors que le vecteur d'état (39) comporte un seul terme avec un facteur de normalisation unité. Physiquement, c'est relié à l'effet de groupement bosonique (ici spatial) ou effet Hanbury-Brown et Twiss.

- les termes en $\hat{\Lambda}^{\dagger 2}$ et $\hat{\Lambda}^2$ sont plus intéressants, ils ne conservent pas le nombre de particules non condensées (mais conservent bien sûr le nombre total de particules). Ils correspondent à la formation de deux particules non condensées par la diffusion l'une sur l'autre de deux particules du condensat, suivant la réaction



ou inversement. Dans un point de vue d'optique quantique, ce sont des termes de compression ("squeezing" en anglais), et l'état fondamental de H_{Bog} sera donc un état comprimé du

champ. Du point de vue de la physique de la matière condensée, ces termes sont cruciaux car ils donnent naissance à une relation de dispersion linéaire des modes d'excitation à faible vecteur d'onde d'un condensat homogène spatialement ($g > 0$), et sont à l'origine de la superfluidité du condensat.

Comme nous l'avons vu dans la section 3.2, la mise d'un hamiltonien quadratique sous forme normale passe par l'identification des modes propres et donc par l'écriture des équations du mouvement en point de vue de Heisenberg. En utilisant les propriétés (283) et $\hat{\Lambda} = Q\hat{\Lambda}$, on trouve ici

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \hat{\Lambda} \\ \hat{\Lambda}^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{L} \begin{pmatrix} \hat{\Lambda} \\ \hat{\Lambda}^\dagger \end{pmatrix} \quad (288)$$

avec

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} h_{\text{GP}} + QNg|\phi|^2Q & QNg\phi^2Q^* \\ -Q^*Ng\phi^{*2}Q & -[h_{\text{GP}}^* + Q^*Ng|\phi|^2Q^*] \end{pmatrix} \quad (289)$$

où l'opérateur à un corps h_{GP} est celui de l'équation de Schrödinger non linéaire :

$$h_{\text{GP}} = h_1 + Ng|\phi|^2 - \mu. \quad (290)$$

On notera que $Qh_{\text{GP}}Q = h_{\text{GP}}$, relation que nous avons utilisée pour simplifier l'écriture. Pour calculer les vecteurs propres de \mathcal{L} de valeur propre non nulle, on peut montrer que la procédure suivante est applicable. On forme l'opérateur \mathcal{L}_{GP} obtenu en enlevant les Q et les Q^* dans \mathcal{L} , si bien que

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} Q & 0 \\ 0 & Q^* \end{pmatrix} \mathcal{L}_{\text{GP}} \begin{pmatrix} Q & 0 \\ 0 & Q^* \end{pmatrix}. \quad (291)$$

Les valeurs propres non nulles de \mathcal{L}_{GP} sont aussi valeurs propres de \mathcal{L} , et les vecteurs propres correspondants de \mathcal{L} sont obtenus par projection des vecteurs propres de \mathcal{L}_{GP} , en faisant agir Q sur la première composante et Q^* sur la seconde [3]. Notons que l'opérateur \mathcal{L}_{GP} est exactement celui que l'on obtient en linéarisant l'équation de Gross-Pitayevski dépendant du temps autour de la solution stationnaire ϕ , ce qui montre que le spectre de Bogolioubov s'obtient exactement par linéarisation de Gross-Pitayevski, un résultat repris dans la section 3.3.7 suivante, et assez paradoxal puisque Gross-Pitayevski est une théorie de champ classique alors que la méthode de Bogolioubov a été développée pour un champ quantique.

3.3.7 Approche de Bogolioubov avec brisure de symétrie $U(1)$

Une propriété claire de l'hamiltonien H est son invariance sous la transformation

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) \leftrightarrow e^{i\alpha} \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (292)$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \leftrightarrow e^{-i\alpha} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \quad (293)$$

où α est un nombre réel quelconque indépendant de la position \mathbf{r} . Ceci est dû au fait que chaque terme de H contient un nombre égal de facteurs $\hat{\psi}$ et de facteurs $\hat{\psi}^\dagger$, ce qui résulte d'ailleurs de la conservation du nombre total de particules. Le groupe de symétrie associé à cette invariance est le groupe $U(1)$.

Dans la littérature, on trouvera souvent une mise en œuvre de la méthode de Bogolioubov qui brise l'invariance par $U(1)$: les auteurs considèrent un état (non physique) du système dans lequel le champ du condensat a « choisi » une phase, si bien qu'ils effectuent la décomposition

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \delta\hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (294)$$

où le champ classique $\psi_0(\mathbf{r})$ est le champ du condensat et le champ quantique $\delta\hat{\psi}(\mathbf{r})$ est de moyenne nulle dans l'état considéré. Ceci implique

$$\langle \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle = \psi_0(\mathbf{r}). \quad (295)$$

Ce point de vue avec brisure de symétrie a l'avantage formel de faire le lien avec la théorie générale des transitions de phase avec paramètre d'ordre, comme celle du ferromagnétisme, $\psi_0(\mathbf{r})$ étant donc ici le paramètre d'ordre. Le prix à payer est l'introduction d'un état non physique; ce problème est résolu en reconstruisant un état physique par mélange statistique des états à symétrie brisée avec toutes les phases possibles de $\langle \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle$, les états à symétrie brisée pouvant donc être vus comme des intermédiaires de calcul.

Dans le point de vue à symétrie brisée, l'ensemble canonique n'est plus utilisable (on a nécessairement $\langle \hat{\psi} \rangle = 0$ dans un état à nombre total de bosons bien défini). Les auteurs considèrent donc l'ensemble grand canonique avec l'hamiltonien

$$H_{GC} = H - \mu_0 \hat{N}. \quad (296)$$

On développe ensuite H_{GC} en puissances de $\delta\hat{\psi}$. À l'ordre zéro en $\delta\hat{\psi}$, on minimise H_{GC} sur ψ_0 et l'on trouve que ψ_0 est solution stationnaire de l'équation de Gross-Pitayevski :

$$(h_1 + g|\psi_0|^2 - \mu_0)\psi_0 = 0. \quad (297)$$

Les termes d'ordre un s'annulent, et les termes quadratiques conduisent aux équations du mouvement

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \delta\hat{\psi} \\ \delta\hat{\psi}^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{L}_{GP} \begin{pmatrix} \delta\hat{\psi} \\ \delta\hat{\psi}^\dagger \end{pmatrix} \quad (298)$$

avec

$$\mathcal{L}_{GP} = \begin{pmatrix} h_{GP} + g|\psi_0|^2 & g\psi_0^2 \\ -g\psi_0^{*2} & -[h_{GP} + g|\psi_0|^2]^* \end{pmatrix} \quad (299)$$

où l'on a introduit l'hamiltonien de Gross-Pitayevski $h_{GP} = h_1 + g|\psi_0|^2 - \mu_0$. On constate que $\mathcal{L}_{GP} \neq \mathcal{L}$, donc on peut craindre que les spectres des deux opérateurs soient différents, et que les approches de

Bogolioubov avec et sans brisure de symétrie soient en contradiction. La discussion qui suit va lever ces doutes.

Une première propriété importante de \mathcal{L}_{GP} est que c'est exactement l'opérateur qui apparaît lorsqu'on linéarise l'équation de Gross-Pitayevski dépendant du temps

$$i\hbar\partial_t\psi = h_1\psi + g|\psi|^2\psi - \mu_0\psi \quad (300)$$

autour de la solution stationnaire ψ_0 . En posant $\psi = \psi_0 + \delta\psi$ et en développant (300) au premier ordre en $\delta\psi$, on trouve en effet que

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \delta\psi \\ \delta\psi^* \end{pmatrix} = \mathcal{L}_{\text{GP}} \begin{pmatrix} \delta\psi \\ \delta\psi^* \end{pmatrix}. \quad (301)$$

Une deuxième propriété importante est que \mathcal{L} est relié à \mathcal{L}_{GP} par

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} Q & 0 \\ 0 & Q^* \end{pmatrix} \mathcal{L}_{\text{GP}} \begin{pmatrix} Q & 0 \\ 0 & Q^* \end{pmatrix} \quad (302)$$

si l'on effectue les identifications $\psi_0 = N^{1/2}\phi$ et $\mu_0 = \mu$. Ceci résulte du fait que $Qh_{\text{GP}} = h_{\text{GP}}Q = h_{\text{GP}}$ puisque $h_{\text{GP}}\phi = 0$; Q , rappelons-le, projette orthogonalement à ϕ .

Une conséquence remarquable de cette deuxième propriété est la suivante, qui réconcilie les deux approches de Bogolioubov : si $\begin{pmatrix} u_{\text{GP}} \\ v_{\text{GP}} \end{pmatrix}$ est un vecteur propre de \mathcal{L}_{GP} avec une valeur propre ϵ non

nulle, alors $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Qu_{\text{GP}} \\ Q^*v_{\text{GP}} \end{pmatrix}$ est vecteur propre de \mathcal{L} avec la valeur propre ϵ .

Ceci découle en particulier de l'existence d'un mode d'énergie nulle pour \mathcal{L}_{GP} :

$$\mathcal{L}_{\text{GP}} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ -\psi_0^* \end{pmatrix} = 0. \quad (303)$$

On peut établir cette identité par substitution directe. Une démonstration plus éclairante utilise le fait que, pour toute solution stationnaire ψ_0 de l'équation de Gross-Pitayevski, on peut construire une famille continue de solutions stationnaires $\alpha \mapsto e^{i\alpha}\psi_0$, $\alpha \in \mathbb{R}$, passant par ψ_0 . Alors, lorsque $\alpha \rightarrow 0$, $\delta\psi = e^{i\alpha}\psi_0 - \psi_0 \simeq i\alpha\psi_0$ donne naissance à un mode d'énergie nulle de \mathcal{L}_{GP} .

Comme on l'a vu dans la section 3.2 sur la diagonalisation d'hamiltoniens quadratiques, les valeurs propres de \mathcal{L}_{GP} vont par paires de valeurs opposées. Le sous-espace associé à l'énergie nulle fait exception [($u = \psi_0$, $v = -\psi_0^*$) est envoyé à un signe global près sur lui-même par la dualité ($u, v \rightarrow (v^*, u^*)$) de l'équation (215)] et contient en fait un « mode anormal » à côté de ψ_0 plutôt que deux modes propres linéairement indépendants. Pour le voir, nous construisons la famille continue de solutions de l'équation de Gross-Pitayevski dépendant du temps (300) paramétrée par le potentiel chimique μ :

$$\mu \mapsto \psi_\mu(\mathbf{r}, t) = \psi_\mu^{\text{st}}(\mathbf{r}) e^{-i(\mu - \mu_0)t/\hbar}, \quad (304)$$

$\psi_\mu^{\text{st}}(\mathbf{r})$ étant solution stationnaire de l'équation de Gross-Pitayevski indépendante du temps de potentiel chimique μ . Cette famille continue passe par ψ_0 en $\mu = \mu_0$. Alors $\delta\psi = \psi_{\mu_0+\delta\mu} - \psi_{\mu_0}$, lorsque $\delta\mu \rightarrow 0$, fournit une solution de l'équation de Gross-Pitayevski (300) linéarisée. On en déduit que

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \partial_\mu \psi_\mu|_{\mu=\mu_0} \\ \partial_\mu \psi_\mu^*|_{\mu=\mu_0} \end{pmatrix} = \mathcal{L}_{\text{GP}} \begin{pmatrix} \partial_\mu \psi_\mu|_{\mu=\mu_0} \\ \partial_\mu \psi_\mu^*|_{\mu=\mu_0} \end{pmatrix}. \quad (305)$$

Or

$$\partial_\mu \psi_\mu|_{\mu=\mu_0} = \partial_\mu \psi_\mu^{\text{st}}|_{\mu=\mu_0} - \frac{it}{\hbar} \psi_0, \quad (306)$$

où le deuxième terme reconstruit le mode d'énergie nulle, si bien que (305) se réduit à

$$\begin{pmatrix} \psi_0 \\ -\psi_0^* \end{pmatrix} = \mathcal{L}_{\text{GP}} \begin{pmatrix} \partial_\mu \psi_\mu^{\text{st}}|_{\mu=\mu_0} \\ \partial_\mu \psi_\mu^{\text{st}*}|_{\mu=\mu_0} \end{pmatrix}. \quad (307)$$

On a donc construit un vecteur \vec{e}_1 tel que $\mathcal{L}_{\text{GP}}\vec{e}_1 = \vec{e}_0$, où \vec{e}_0 est le mode d'énergie nulle. La matrice de \mathcal{L}_{GP} dans le sous-espace stable engendré par \vec{e}_0 et \vec{e}_1 est donc

$$\text{mat}(\mathcal{L}_{\text{GP}}, \text{Vec}\{\vec{e}_0, \vec{e}_1\}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (308)$$

Cette matrice nilpotente, non diagonalisable, est sous la forme normale de Jordan. On en déduit que \mathcal{L}_{GP} n'est pas diagonalisable.

En poursuivant le calcul, on trouve comme dans l'exemple numéro deux de la section 3.2.3, que l'hamiltonien de Bogolioubov sous forme normale contient nécessairement un terme de particule libre en $P^2/2m_{\text{eff}}$, en plus des termes $\epsilon_k b_k^+ b_k$ d'oscillateurs harmoniques. La variable quantique Q conjuguée à P , telle que $[P, Q] = -i$, est simplement la phase du champ, avec la convention que le facteur de phase dans le champ $\hat{\psi}$ est e^{-iQ} . La variable P correspond aux fluctuations $\hat{N} - N_0$ du nombre total de particules, avec $N_0 = \int |\psi_0|^2$. Ce terme en P^2 se retrouve très directement en considérant l'énergie grand canonique - le grand potentiel - de l'état fondamental pour $N_0 + P$ particules et en développant au second ordre en P :

$$E(N_0 + P) - \mu_0(N_0 + P) = E(N_0) - \mu_0 N_0 + \frac{1}{2} \mu'(N_0) P^2 + O(P^3), \quad (309)$$

l'absence de terme linéaire résultant de $E'(N_0) = \mu_0$, et $E'(N) = \mu(N)$ étant le potentiel chimique (ici au niveau d'approximation de Gross-Pitayevski) pour un gaz à N particules. On en déduit que

$$\frac{1}{m_{\text{eff}}} = \mu'(N_0). \quad (310)$$

Pour être complet, nous donnons les expressions explicites de P et Q en fonction des fluctuations quantiques du champ :

$$Q = i\mu'(N_0) \int d^3r \left[\partial_\mu \psi_\mu^{\text{st}*}|_{\mu=\mu_0} \delta\hat{\psi} - \text{h.c.} \right] \quad (311)$$

$$P = \int d^3r [\psi_0^* \delta\hat{\psi} + \text{h.c.}]. \quad (312)$$

Tout ceci rappelle le phénomène de Goldstone : lorsqu'une symétrie continue est brisée dans une théorie de champ, le système admet une branche continue d'excitation passant par l'énergie nulle. Ici, cette branche correspond au changement de N traitée comme une variable continue.

3.3.8 Applications de la méthode de Bogolioubov

Utilisons la méthode de Bogolioubov pour calculer la densité de particules non condensées dans un gaz de bosons spatialement homogène en interaction répulsive à l'équilibre thermique, en étendant directement les résultats de la section 3.3.6 à une dimension d quelconque, $d \in \{1; 2; 3\}$ (on remplace $\int d^3 r$ par $\int d^d r$ dans l'hamiltonien (248) et les calculs qui s'ensuivent, la proportionnalité de g à la longueur de diffusion a étant perdue pour $d < 3$ bien entendu²). Avant de passer à la limite thermodynamique, nous considérons un gaz de taille finie à N particules et nous utilisons le volume de quantification $\mathbf{r} \in [0, L]^d$ avec des conditions aux limites périodiques. La fonction d'onde du condensat est alors simplement $\phi(\mathbf{r}) = 1/L^{d/2}$, avec un potentiel chimique de Gross-Pitayevski $\mu = \rho g$, où $\rho = N/L^d$ est la densité totale. Les modes propres de l'opérateur \mathcal{L} défini par (289) sont simplement des ondes planes, à cause de l'invariance par translation de ϕ . Les modes de Bogolioubov de la famille \mathcal{F}_+ sont donc de la forme

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{U_{\mathbf{k}}}{L^{d/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (313)$$

$$v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{V_{\mathbf{k}}}{L^{d/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (314)$$

avec la condition de normalisation $|U_{\mathbf{k}}|^2 - |V_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, comme expliqué dans la section 3.2.3. La présence du projecteur Q dans (289) correspond à la condition $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$, ce qui découle de la transversalité de l'opérateur champ non condensé par rapport au mode du condensat. Un calcul explicite des valeurs propres de \mathcal{L} dans la famille \mathcal{F}_+ , par diagonalisation d'une matrice 2×2 , donne le fameux spectre d'excitation de Bogolioubov

$$\epsilon_k = \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\mu \right) \right]^{1/2} \quad (315)$$

avec les amplitudes des modes propres associés définies par :

$$U_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{k}} = \frac{1}{U_{\mathbf{k}} - V_{\mathbf{k}}} = \left(\frac{\hbar^2 k^2 / (2m)}{2\mu + \hbar^2 k^2 / (2m)} \right)^{1/4}. \quad (316)$$

Dans le cas d'une interaction attractive, $g < 0$, on voit qu'une instabilité dynamique se produit lorsque

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 < 2 \frac{N}{L^d} |g|, \quad (317)$$

2. En dimension $d = 1$, le modèle d'une interaction en delta de Dirac $g\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ est parfaitement légitime (il ne conduit à aucune divergence de l'énergie) et l'on a simplement $g = -2\hbar^2 / (ma_{1D})$ où la longueur de diffusion a_{1D} est définie dans l'équation (483). Le cas $d = 2$, plus subtil que $d = 3$, est discuté brièvement en fin de la présente section 3.3.8.

puisque la valeur minimale non nulle de k compte tenu des conditions aux limites périodiques est $2\pi/L$; le condensat spatialement homogène n'existe donc que pour un nombre de particules condensées assez faible. Dans la suite, on suppose que l'interaction est répulsive, $g > 0$, ce qui permet de passer à la limite thermodynamique.

Il est utile de noter le comportement limite du spectre d'excitation et des amplitudes U_k et V_k à faible k :

$$\epsilon_k \sim \hbar k \left(\frac{\mu}{m} \right)^{1/2} \quad (318)$$

$$U_k \sim -V_k \sim \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\mu}{\hbar^2 k^2} \right)^{1/4} \quad (319)$$

et à grand k :

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \mu + O(1/k^2) \quad (320)$$

$$U_k = 1 + O(1/k^4) \quad (321)$$

$$V_k \sim -\frac{m\mu}{\hbar^2 k^2}. \quad (322)$$

Le terme μ au second membre de (320) s'obtient facilement par la théorie de champ moyen de Hartree-Fock, il est la conséquence du fait qu'une particule non condensée voit un champ moyen créé par le condensat double de celui vu par une particule du condensat, ce qui est une manifestation de l'effet Hanbury-Brown et Twiss, voir après l'équation (286).

Superfluidité à la Landau. Une première application importante s'appuie sur la forme du spectre d'excitation, qui commence linéairement à faible k , au lieu de quadratiquement pour le gaz parfait. Ceci signifie que les modes de basse énergie sont des ondes sonores, qui se propagent dans le gaz avec une vitesse c telle que $\mu = mc^2$, en accord à l'ordre du calcul effectué ici avec la relation hydrodynamique $mc^2 = \rho d\mu/d\rho$ exacte à $T = 0$. Dans la théorie de Bogolioubov, il n'y a pas d'autre branche d'excitation. Un argument dû à Landau montre que le gaz doit alors être superfluide à température nulle. Considérons en effet une particule test de masse M , discernable des particules du gaz, arrivant avec un vecteur d'onde \mathbf{q} sur le gaz à température nulle. Cette particule test peut-elle, par interaction avec les particules du gaz, y déposer des excitations (et donc voir son mouvement freiné)? Si une quasi-particule de vecteur d'onde \mathbf{k} est créée, la conservation de l'impulsion et de l'énergie conduit à la contrainte

$$\frac{\hbar^2 q^2}{2M} = \epsilon_k + \frac{\hbar^2 (\mathbf{q} - \mathbf{k})^2}{2M}. \quad (323)$$

Après développement de la norme au carré du vecteur $\mathbf{q} - \mathbf{k}$ et simplification, il vient

$$v \cos \theta = \frac{\epsilon_k}{\hbar k} + \frac{\hbar k}{2M}, \quad (324)$$

où $v = \hbar q/M$ est le module de la vitesse initiale de la particule test et θ est l'angle entre cette vitesse initiale et le vecteur d'onde \mathbf{k} de l'excitation produite. La forme du spectre d'excitation (315) permet

de voir que le second membre de (324) admet comme borne inférieure sur k la vitesse du son c . Si la particule test arrive avec une vitesse inférieure strictement à la vitesse du son, l'équation (324) n'admet pas de solution réelle donc la particule test ne peut pas créer d'excitation dans le gaz. Ce raisonnement se généralise à un nombre quelconque d'excitations créées de vecteurs d'onde $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n$, il suffit d'utiliser la propriété $\epsilon_k > \hbar ck$ et l'inégalité triangulaire $|\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n| \leq k_1 + \dots + k_n$. On en déduit que le gaz est entièrement superfluide à température nulle.

Effet de la dimensionalité sur la condensation. À l'aide de la décomposition modale (241), qui s'écrit ici

$$\hat{\Lambda}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) b_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) b_{\mathbf{k}}^+, \quad (325)$$

on obtient la densité non condensée

$$\rho_{\text{nc}} = \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} [V_{\mathbf{k}}^2 + n_{\mathbf{k}}(U_{\mathbf{k}}^2 + V_{\mathbf{k}}^2)], \quad (326)$$

où $n_{\mathbf{k}} = 1/[\exp(\epsilon_{\mathbf{k}}/k_{\text{B}}T) - 1]$ est le nombre d'occupation thermique du mode \mathbf{k} . À la limite thermodynamique, on remplace la somme par une intégrale, $L^{-d} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \rightarrow \int_{\mathbb{R}^d} d^d k / (2\pi)^d$. Le fait de trouver un résultat fini ou infini dépend de la dimension de l'espace et de la température, et se déduit facilement des comportements aux limites des $\epsilon_{\mathbf{k}}$, $U_{\mathbf{k}}$ et $V_{\mathbf{k}}$ donnés précédemment :

- en dimension trois, l'intégrale converge aussi bien à grand k qu'à faible k . La théorie de Bogolioubov prédit l'existence d'un condensat, et donne une prédiction pour la densité non condensée, au moins dans son domaine de validité $\rho_{\text{nc}} \ll \rho$.
- en dimension deux, à température nulle, l'intégrale converge : un condensat peut exister. À température non nulle, l'intégrale diverge logarithmiquement en $k = 0$: il n'y a pas de condensat à la limite thermodynamique, mais comme la divergence est lente, il sera assez facile de produire un condensat dans une boîte de taille finie.
- en dimension un, l'intégrale diverge logarithmiquement en $k = 0$ à température nulle : pas de condensation à la limite thermodynamique, mais un condensat est assez facile à observer dans un système de taille finie. À température non nulle, la divergence en $k = 0$ est sévère : pas de condensat à la limite thermodynamique, obtention possible mais « difficile » dans un système de taille finie.

En dimension un et en dimension deux, une extension de la théorie de Bogolioubov permet de voir ce qui se passe, par un calcul de la fonction de corrélation du champ $\langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{0}) \rangle$ [4]. À température nulle, il est instructif de calculer la fraction non condensée à la limite thermodynamique en termes de la densité totale ρ et de la longueur de relaxation ξ telle que $\hbar^2 / (m\xi^2) = \mu$:

$d = 3$	$d = 2$	$d = 1$
$\frac{\langle \Lambda^\dagger \Lambda \rangle}{\rho} = \frac{(3\pi^2)^{-1}}{\rho \xi^3}$	$\frac{\langle \Lambda^\dagger \Lambda \rangle}{\rho} = \frac{(4\pi)^{-1}}{\rho \xi^2}$	$\frac{\langle \Lambda^\dagger \Lambda \rangle}{\rho} \sim \frac{\ln(L/\xi)(2\pi)^{-1}}{\rho \xi}$

Ceci montre donc que le régime d'interaction faible en dimension d correspond à

$$\rho \xi^d \gg 1. \quad (327)$$

Ce qui était prévisible au niveau de l'équation de Gross-Pitayevski : le « bourrelet cicatriciel » de largeur ξ que présente la fonction d'onde du condensat au voisinage d'un obstacle quasi ponctuel im-pénétrable (un cœur dur de rayon $\ll \xi$) ne peut être bien décrit par le terme de champ moyen $gN|\phi|^2$ que s'il y a en moyenne beaucoup de particules dans le volume ξ^d . On notera que l'équation (327) correspond à une limite de faible densité en dimension trois, de forte densité en dimension un. En dimension deux, $\rho \xi^2$ semble ne pas dépendre de la densité, étant simplement égal à $\hbar^2/(mg)$; mais g doit alors, dans cette dimension critique, être interprété comme une constante de couplage effective, qui dépend faiblement (logarithmiquement) de la densité et de la longueur de diffusion a_{2D} de l'équation (482), $g \simeq 4\pi\hbar^2/[m|\ln(\rho a_{2D}^2)|]$ à basse densité, ce qui est également discuté dans la référence [4]. Signalons pour terminer le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg, qui prédit effectivement l'absence de condensation de Bose à température non nulle en dimension un et en dimension deux, à la limite thermodynamique [5].

3.3.9 Régularisation de la théorie de Bogolioubov en dimension trois

Comme on le voit au moyen de la section 3.3.8 et de l'équation (246) appliquée à l'hamiltonien quadratique (285), la méthode de Bogolioubov pour un gaz de bosons à trois dimensions avec une interaction $V(\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = g\delta(\mathbf{r})$ prédit pour l'énergie de l'état fondamental :

$$E_0 = \frac{gN^2}{2L^3} - L^3 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \epsilon_k V_k^2. \quad (328)$$

Nous sommes ici dans le cas d'un système homogène dans une boîte cubique de côté L avec des conditions aux limites périodiques, et nous nous plaçons à la limite thermodynamique. Compte tenu du comportement asymptotique de V_k et ϵ_k à grand k , voir les équations (322) et (320), l'intégrale dans (328) a une sévère divergence ultraviolette. Ceci est dû au fait que le modèle d'une interaction en delta de Dirac à 3D n'a aucun sens. On le voit bien sur l'équation de Schrödinger pour l'état stationnaire de diffusion à deux corps à énergie nulle :

$$0 = -\frac{\hbar^2}{m}\Delta\psi_0(\mathbf{r}) + g\delta(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r}), \quad (329)$$

la masse réduite valant ici $m/2$ où m est la masse d'un boson. On se convainc aisément que $\psi_0(\mathbf{0}) \neq 0$, si bien que le laplacien de ψ_0 est proportionnel à la distribution de Dirac donc $\psi_0(\mathbf{r})$ diverge en $1/r$ à l'origine, auquel cas la multiplication de ψ_0 par $\delta(\mathbf{r})$ n'a aucun sens. Le problème subsiste à 2D (divergence en $\ln r$) mais disparaît à 1D.

Il faut donc utiliser un autre modèle, si possible en gardant la simplicité d'une interaction de contact. Historiquement, Huang utilisa le pseudo-potentiel de Fermi, qui est une distribution étendant l'action de la distribution de Dirac aux fonctions divergeant en $1/r$, $V = g\delta(\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial r}[r \cdot]$. Il a été

réalisé depuis que l'hamiltonien correspondant n'est en fait pas auto-adjoint pour un nombre de particules $N \geq 3$, même si ceci n'a pas d'importance à l'ordre de la théorie de Bogolioubov. Nous utilisons ici un modèle plus simple, manifestement auto-adjoint et qui a l'avantage d'illustrer de façon très contrôlée les idées de la suppression des divergences par renormalisation des paramètres de l'hamiltonien, centrales en électrodynamique quantique. Notre modèle est un modèle sur réseau : les positions sont discrétisées sur un réseau cubique de pas b [4]. L'interaction se produit seulement entre bosons sur le même site : pour deux particules, en passant aux coordonnées relatives, ceci correspond au potentiel

$$V = g_0 \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{0}}}{b^3} = g_0 |\mathbf{r} = \mathbf{0}\rangle \langle \mathbf{r} = \mathbf{0}|. \quad (330)$$

Ici g_0 est la constante de couplage nue, différente de $g = 4\pi\hbar^2 a/m$; on a divisé le delta de Kronecker par b^3 pour retrouver formellement une distribution de Dirac à la limite continue $b \rightarrow 0$. Les chets $|\mathbf{r}\rangle$ représentant la particule relative localisée au site \mathbf{r} sont normalisés ainsi,

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{b^3} \quad (331)$$

de façon à retrouver là aussi le cas continu lorsque $b \rightarrow 0$. Comme les coordonnées des particules sont des multiples entiers de b , les composantes du vecteur d'onde \mathbf{k} d'une onde plane sur le réseau ont un sens modulo $2\pi/b$ donc nous restreignons \mathbf{k} à la première zone de Brillouin :

$$\mathbf{k} \in \mathcal{D} \equiv [-\pi/b, \pi/b]^3. \quad (332)$$

L'énergie cinétique d'une particule dans l'onde plane de vecteur d'onde \mathbf{k} est simplement $\hbar^2 k^2 / (2m)$.

Il faut ajuster g_0 pour que notre modèle donne la bonne valeur de la longueur de diffusion. En anticipant sur la section 4.5 et sur la section 4.3, nous allons donc calculer la matrice $T(E + i\eta)$, $\eta \rightarrow 0^+$, pour un réseau s'étendant à l'infini (sans volume de quantification). C'est élémentaire grâce à la localité de V : la définition $T = V + VGV$ donne

$$T = |\mathbf{r} = \mathbf{0}\rangle \langle \mathbf{r} = \mathbf{0}| [g_0 + g_0^2 \langle \mathbf{r} = \mathbf{0} | G | \mathbf{r} = \mathbf{0} \rangle] \quad (333)$$

et la relation $G = G_0 + G_0 V G$ conduit finalement à

$$T = |\mathbf{r} = \mathbf{0}\rangle \langle \mathbf{r} = \mathbf{0}| \frac{g_0}{1 - g_0 \langle \mathbf{r} = \mathbf{0} | G_0 | \mathbf{r} = \mathbf{0} \rangle}. \quad (334)$$

On constate que la matrice T est locale et portée entièrement par le site où le vecteur position relatif des deux particules est nul. En utilisant l'expression (471) de l'amplitude de diffusion dans la limite $E \rightarrow 0$ et la propriété (475), on obtient

$$g_0 = \frac{g}{1 + g \langle \mathbf{r} = \mathbf{0} | G_0(E=0) | \mathbf{r} = \mathbf{0} \rangle}. \quad (335)$$

En injectant une relation de fermeture dans l'espace des ondes planes, on trouve par ailleurs que

$$\langle \mathbf{r} = \mathbf{0} | G_0(E = 0) | \mathbf{r} = \mathbf{0} \rangle = - \int_{\mathcal{D}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2 k^2} = - \frac{mK}{4\pi\hbar^2 b} \quad (336)$$

avec

$$K = \frac{12}{\pi} \int_0^{\pi/4} d\theta \ln(1 + 1/\cos^2 \theta) = 2,4427\dots \quad (337)$$

Une écriture commode et facile à retenir est donc

$$\frac{1}{g_0} = \frac{1}{g} - \int_{\mathcal{D}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2 k^2}. \quad (338)$$

Revenons au problème à N corps. La méthode de Bogolioubov n'est en fait applicable qu'à un potentiel d'interaction (presque) traitable dans l'approximation de Born à basse énergie. L'approximation de Born conduirait à $g_0 = g$. Le régime de Born suppose donc que g_0 diffère peu de g , c'est-à-dire que $g|\langle \mathbf{r} = \mathbf{0} | G_0(E = 0) | \mathbf{r} = \mathbf{0} \rangle| \ll 1$, donc

$$a \ll b. \quad (339)$$

Notons d'ailleurs que la limite inverse $b \ll a$ conduit à g_0 négatif, ce qui compromet la stabilité du gaz de bosons. À l'ordre de la théorie de Bogolioubov, on retient donc

$$g_0 \simeq g + g^2 \int_{\mathcal{D}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2 k^2}. \quad (340)$$

L'énergie de l'état fondamental du gaz vaut maintenant

$$E_0 = \frac{g_0 N^2}{2L^3} - L^3 \int_{\mathcal{D}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \epsilon_k V_k^2, \quad (341)$$

où g a été remplacé partout par g_0 puisque le coefficient du delta dans le potentiel d'interaction n'est plus g mais g_0 . À cet ordre du calcul, nous pouvons néanmoins identifier g_0 à g dans la correction $\epsilon_k V_k^2$; en revanche, il faut bien garder g_0 devant N^2 dans le terme dominant (le terme de Gross-Pitayevski). Le premier terme dépend ainsi explicitement de la coupure $1/b$ introduite par le réseau; le second terme en dépend aussi *via* la divergence ultraviolette de l'intégrale. En remplaçant g_0 par (340), en regroupant les deux intégrales et en prenant la limite de faible densité $b \ll \xi$ (avec $\hbar^2/(m\xi^2) = \rho g$), on trouve

$$E_0 = \frac{gN^2}{2L^3} - L^3 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left[\epsilon_k V_k^2 - \frac{m\rho^2 g^2}{2\hbar^2 k^2} \right] \quad (342)$$

qui n'a plus de divergence ultraviolette. Après calcul de l'intégrale sur \mathbb{R}^3 en coordonnées sphériques, on obtient une expression explicite pour l'énergie par particule à l'ordre de Bogolioubov :

$$\frac{E_0^{\text{Bog}}}{N} = \frac{1}{2} \rho g \left[1 + \frac{16}{15\pi^2} \frac{1}{\rho \xi^3} \right] = \frac{1}{2} \rho g \left[1 + \frac{128}{15\pi^{1/2}} (\rho a^3)^{1/2} \right], \quad (343)$$

qui coïncide avec la prédiction de Lee et Yang obtenue par une autre méthode [6]. On obtient le même résultat en utilisant la méthode de Bogolioubov avec le pseudo-potentiel de Fermi [7].

4 La résolvante

4.1 Position du problème

Il s'agit d'étudier l'évolution hamiltonienne d'un système quantique dont le spectre comporte un continuum, situation rencontrée dans de nombreux cas en physique et qui donne naissance à des comportements de type irréversibilité. Notons que l'hypothèse d'une évolution hamiltonienne n'est pas aussi restrictive qu'il y paraît de prime abord : si un système subit une dynamique non hamiltonienne due au couplage à un réservoir, il suffit en général d'agrandir le système en y incluant le réservoir pour aboutir à un problème hamiltonien.

Dans cette section, on se limite au cas d'un hamiltonien indépendant du temps. Là aussi, ce n'est pas aussi restrictif qu'il y paraît. Prenons l'exemple d'un atome placé dans le champ électromagnétique d'un laser : si le champ laser est traité classiquement, l'hamiltonien dépend du temps ; si le champ laser est traité quantiquement, par la méthode de l'atome habillé, l'hamiltonien devient indépendant du temps.

Physiquement, on est en général dans la situation où l'hamiltonien complet s'écrit

$$H = H_0 + V \quad (344)$$

et où l'on sait diagonaliser H_0 (son spectre et ses vecteurs propres sont connus), mais l'on ne sait pas diagonaliser H . La « perturbation » V peut être, selon les cas, faible ou pas. Donnons deux cas types de cette situation :

- cas I : la physique atomique. H_0 contient l'hamiltonien de l'atome incluant seulement l'énergie cinétique des constituants et leur couplage dû à la partie longitudinale (électrostatique) du champ, c'est-à-dire l'interaction coulombienne. H_0 contient aussi l'hamiltonien du champ électromagnétique libre. V donne le couplage, par exemple dipolaire électrique $-\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}$, entre l'atome et le champ quantique.
- cas II : la diffusion d'une onde ou d'une particule sur un potentiel à courte portée $V(\mathbf{r})$. Dans le cas d'une particule de masse m , H_0 est l'opérateur énergie cinétique $\mathbf{p}^2/(2m)$ et $V = V(\mathbf{r})$.

En pratique, on cherche souvent à déterminer l'évolution du système en présence de la « perturbation » V lorsque l'état initial est un état propre de H_0 :

- dans le cas I, l'exemple typique est celui d'un atome dans un état excité e en présence du champ quantique dans l'état vide ; sous l'effet du couplage atome-champ, l'état e acquiert une durée de vie finie, l'atome tombant dans un état de plus basse énergie en émettant spontanément un photon (effet *dissipatif* du couplage). Mais l'on sait aussi que l'énergie de l'état e subit un déplacement réel appelé déplacement de Lamb (effet *réactif* du couplage). Il s'agit de déterminer la variation temporelle de l'amplitude de probabilité de trouver l'atome dans l'état e , pour décrire ces deux effets.
- dans le cas II, l'exemple typique est la diffusion d'une onde plane incidente de vecteur d'onde \mathbf{k}_0 dans les autres modes d'ondes planes de vecteurs d'onde \mathbf{k} . Il s'agit de déterminer la section

efficace de diffusion, et plus généralement l'amplitude de diffusion de \mathbf{k}_0 vers \mathbf{k} .

4.2 Rappel du formalisme élémentaire : calcul perturbatif de l'opérateur d'évolution

On rappelle que l'opérateur d'évolution $U(t)$ associé à l'hamiltonien H est l'opérateur unitaire solution de

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t) = H U(t) \quad (345)$$

avec la condition initiale $U(0) = 1$. Comme H est ici indépendant du temps, on peut écrire formellement

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar}. \quad (346)$$

On introduit aussi l'opérateur d'évolution non perturbé,

$$U_0(t) = e^{-iH_0 t/\hbar}. \quad (347)$$

Le point de départ du développement perturbatif de U en puissances de V est l'obtention d'une équation intégrale sur $U(t)$. On remplace H par $H_0 + V$ dans (345) puis l'on intègre formellement sur le temps en considérant $VU(t)$ comme un terme source, par la méthode de variation de la constante :

$$U(t) = U_0(t) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau U_0(t-\tau) V U(\tau). \quad (348)$$

Le développement perturbatif s'en déduit par itération :

$$U(t) = U_0(t) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau U_0(t-\tau) V U_0(\tau) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 U_0(t-\tau_2) V U_0(\tau_2-\tau_1) V U_0(\tau_1) + \dots \quad (349)$$

L'un des succès majeurs de cette approche élémentaire est l'obtention de la règle d'or de Fermi, donnant le taux de décroissance d'un état initial $|i\rangle$ état propre discret de H_0 couplé par V à un continuum d'états propres $|f\rangle$ de H_0 . On introduit le taux de transition élémentaire

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|V|i\rangle|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0), \quad (350)$$

où les énergies E^0 sont les énergies non perturbées (donc des valeurs propres de H_0) et δ est la distribution de Dirac. Il reste à intégrer le taux élémentaire sur les états $|f\rangle$ du continuum pour obtenir le taux total de départ Γ_i^{tot} . Nous reviendrons sur les conditions de validité de cette « règle d'or », mais notons qu'elle prédit l'évolution suivante de la probabilité π_i de trouver le système dans l'état initial :

$$\pi_i(t) \simeq 1 - \Gamma_i^{\text{tot}} t. \quad (351)$$

Ceci n'est valable qu'aux temps assez courts pour que

$$\Gamma_i^{\text{tot}} t \ll 1. \quad (352)$$

En particulier, la méthode ne permet pas de prédire par exemple que la décroissance est exponentielle aux temps plus longs,

$$\pi_i(t) \stackrel{?}{\simeq} e^{-\Gamma_i^{\text{tot}} t}. \quad (353)$$

L'une des motivations de cette section 4 est d'exposer une approche plus puissante que la théorie perturbative élémentaire, permettant d'avoir des prédictions aux temps longs. Le « nouvel » outil à la base de cette approche plus puissante est l'opérateur résolvante de l'hamiltonien.

4.3 La résolvante de l'hamiltonien

La résolvante de H est l'opérateur suivant :

$$G(z) = \frac{1}{z - H} \quad (354)$$

paramétré par un nombre z appartenant au plan complexe privé du spectre de H noté $\text{Spec } H$ dans la suite. Pour une telle valeur de z , on peut en effet définir l'inverse $G(z)$ de l'opérateur $z\hat{1} - H$, où $\hat{1}$ est l'opérateur identité. Pour simplifier, suivant la coutume, on note $\hat{1}$ simplement comme 1, $z\hat{1}$ simplement comme z , et l'inverse d'un opérateur A comme $1/A$, d'où l'écriture (354).

4.3.1 Propriétés analytiques de $G(z)$

Il est utile d'introduire d'abord la décomposition spectrale de l'hamiltonien H supposé auto-adjoint :

$$H = \sum_i E_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| + \int dk E_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|. \quad (355)$$

La somme porte sur les états propres discrets de H , et l'intégrale sur les états propres du continuum, k étant ici un vecteur à n composantes réelles. Les états discrets sont normalisés comme d'habitude :

$$\langle\phi_i|\phi_{i'}\rangle = \delta_{ii'} \quad (356)$$

où, rappelons-le, δ est un delta discret de Kronecker. Les états du continuum n'ont pas une fonction d'onde de carré sommable mais sont normalisés ainsi :

$$\langle\psi_k|\psi_{k'}\rangle = \delta(k - k') \quad (357)$$

où δ est maintenant la distribution de Dirac dans \mathbb{R}^n . On a également la relation $\langle\phi_i|\psi_k\rangle = 0$. On en déduit la décomposition spectrale de l'opérateur identité, que l'on appelle habituellement relation de fermeture :

$$\hat{1} = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| + \int dk |\psi_k\rangle\langle\psi_k|. \quad (358)$$

Une première application de cette décomposition spectrale de H est de montrer que $G(z)$ est analytique sur son domaine de définition $\mathbb{C} \setminus \text{Spec } H$. Plus précisément, pour tout vecteur normalisable $|u\rangle$, la fonction

$$f_{uu}(z) = \langle u|G(z)|u\rangle \quad (359)$$

est une fonction analytique sur $\mathbb{C} \setminus \text{Spec } H$. Considérons en effet un nombre complexe z_0 à une distance non nulle δ du spectre de H , et montrons que le développement en série entière de $f_{uu}(z)$ au voisinage de z_0 a un rayon de convergence non nul (comme il est fait dans le livre de Claude Cohen-Tannoudji, Jacques Dupont-Roc et Gilbert Grynberg indiqué dans la bibliographie). On part de

$$G(z) = \frac{1}{z-H} = \frac{1}{z-z_0+z_0-H} = \frac{1}{z_0-H} \frac{1}{1+\frac{z-z_0}{z_0-H}} = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{(z-z_0)^n}{(z_0-H)^{n+1}}. \quad (360)$$

Or, en injectant la relation de fermeture, on a

$$c_n = \langle u|\frac{1}{(z_0-H)^{n+1}}|u\rangle = \sum_i \frac{|\langle u|\phi_i\rangle|^2}{(z_0-E_i)^{n+1}} + \int dk \frac{|\langle u|\psi_k\rangle|^2}{(z_0-E_k)^{n+1}} \quad (361)$$

et en utilisant $|z_0-E_i| \geq \delta$, $|z_0-E_k| \geq \delta$, on obtient

$$\langle u|G(z)|u\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n c_n (z-z_0)^n \quad \text{avec} \quad |c_n| \leq \frac{\langle u|u\rangle}{\delta^{n+1}}. \quad (362)$$

La série formelle est donc absolument convergente si $|z-z_0| < \delta$. On peut en déduire aisément que l'élément de matrice non diagonal entre deux états normalisables est analytique :

$$f_{uv}(z) = \langle u|G(z)|v\rangle. \quad (363)$$

En effet, pour tout nombre complexe ϵ , la fonction

$$z \mapsto (\langle u| + \epsilon^* \langle v|)G(z)(|u\rangle + \epsilon|v\rangle) \quad (364)$$

est analytique, donc, par développement des produits scalaires, on trouve que la fonction $\epsilon f_{uv}(z) + \epsilon^* f_{vu}(z)$ est analytique. En prenant $\epsilon = 1$ puis $\epsilon = i$ et en effectuant la demi-somme des expressions correspondantes, on conclut à l'analyticité de $f_{uv}(z)$.

Une seconde application de la décomposition spectrale est l'étude des singularités de $G(z)$ dans le plan complexe. Ces singularités ne peuvent bien sûr apparaître que sur l'axe réel. Si l'on fait tendre z vers une énergie propre discrète E_i , on obtient

$$G(z) \sim \frac{|\phi_i\rangle\langle\phi_i|}{z-E_i}. \quad (365)$$

On voit donc que $G(z)$ présente un *pôle simple* en chaque point du spectre discret de H . Faisons maintenant tendre z vers une valeur réelle E n'appartenant pas au spectre discret. Plus précisément, on fait tendre z vers E par au-dessus ou par en dessous :

$$z = E \pm i\eta \quad \text{avec} \quad \eta \rightarrow 0^+. \quad (366)$$

Il reste à utiliser le fait qu'au sens des distributions :

$$\frac{1}{x + i\eta} = \text{v.p.} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \quad (367)$$

où v.p. est la valeur principale de Cauchy et δ la distribution de Dirac dans \mathbb{R} , pour obtenir

$$G(E \pm i\eta) = \sum_i \frac{|\phi_i\rangle\langle\phi_i|}{E - E_i} + \int dk \left[\text{v.p.} \frac{1}{E - E_k} \mp i\pi\delta(E - E_k) \right] |\psi_k\rangle\langle\psi_k|. \quad (368)$$

On voit donc qu'en général la résolvante admet une limite finie lorsque $z \rightarrow E$, pourvu que E n'appartienne pas au spectre discret. Cependant, si E appartient au spectre continu, la valeur de la limite dépend du fait que l'on tende vers E par au-dessus ou par en dessous : la différence des limites

$$G(E + i\eta) - G(E - i\eta) = -2i\pi \int dk \delta(E - E_k) |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \quad (369)$$

est en effet non nulle si la densité d'états $\rho(E)$ du continuum est non nulle :

$$\rho(E) = \int dk \delta(E - E_k). \quad (370)$$

On voit donc que la résolvante présente *une ligne de coupure* sur l'axe réel, à l'endroit du continuum d'énergies propres de H .

Il est possible de « déplacer » la ligne de coupure (mais bien sûr pas de la faire disparaître) en faisant un prolongement analytique de la résolvante, par exemple du demi-plan supérieur au demi-plan inférieur. Il est commode de choisir la nouvelle ligne de coupure dans le demi-plan inférieur parallèle à l'axe imaginaire pur et commençant au bord du continuum, comme indiqué sur la figure 4. Dans le demi-plan inférieur à droite de la nouvelle ligne de coupure, le prolongement analytique de $G(z)$, appelé $G_a(z)$, est *distinct* de $G(z)$ et peut présenter des pôles en des points complexes z_a de parties imaginaires strictement négatives. Comme nous le verrons, la présence de ces pôles, due *in fine* à l'existence d'un continuum dans le spectre de H , conduit à des contributions décroissant de façon exponentielle, donc « irréversible », dans les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution.

4.3.2 Lien de la résolvante avec l'opérateur d'évolution

Pour revenir au problème, nous montrons que l'opérateur d'évolution se déduit de l'opérateur résolvante essentiellement par une transformée de Fourier, avec un chemin d'intégration cependant inhabituel.

Il est commode d'introduire pour cela l'opérateur communément appelé « fonction de Green retardée »,

$$U_+(t) \equiv U(t)Y(t) \quad (371)$$

où Y est la fonction de Heaviside. L'appellation « fonction de Green » se justifie par le fait que $U_+(t)$ est solution de l'équation

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_+(t) = H U_+(t) + i\hbar\delta(t), \quad (372)$$

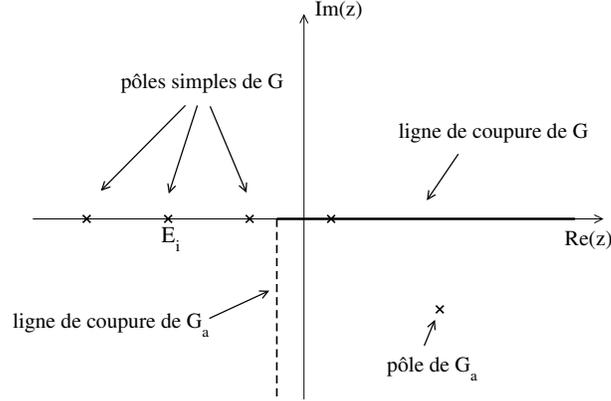


FIGURE 4 – Dans le plan complexe, résumé des propriétés analytiques de la résolvante $G(z)$ et de son prolongement analytique $G_a(z)$ du demi-plan supérieur au demi-plan inférieur. Le spectre discret de H correspond aux croix sur l'axe réel, et le spectre continu de H correspond au trait épais sur l'axe réel.

qui se déduit donc de l'équation sur $U(t)$ par l'ajout du terme inhomogène $i\hbar\delta(t)$. Le terme « retardée » traduit le fait que $U_+(t) = 0$ pour $t < 0$. Considérons la transformée de Fourier de $U_+(t)$:

$$\text{TF}[U_+](E) = \int_0^{+\infty} dt e^{iEt/\hbar} U_+(t) e^{-\eta t/\hbar}. \quad (373)$$

Dans cette écriture de la transformée de Fourier, nous avons effectué deux modifications par rapport à l'écriture habituelle. D'abord, nous avons pris comme borne inférieure d'intégration temporelle 0 plutôt que $-\infty$, ce qui est légitime puisque $U_+(t)$ est nul à $t < 0$. Ensuite, nous avons inclus le facteur de convergence $e^{-\eta t/\hbar}$, où η est un nombre réel strictement positif que l'on fait tendre vers zéro à la fin des calculs. En l'absence de ce facteur de convergence, on voit bien qu'il ne faut pas en général espérer que l'intégrale converge en $t = +\infty$ car $U(t)$ contient des termes oscillants. L'inclusion d'un facteur de convergence revient de façon pédestre à définir la transformée de Fourier au sens des distributions. On obtient finalement au vu de (346) :

$$\text{TF}[U_+](E) = \int_0^{+\infty} dt e^{i(E+i\eta-H)t/\hbar} = \frac{i\hbar}{E+i\eta-H}. \quad (374)$$

Par transformée de Fourier inverse, on exprime $U_+(t)$ en fonction de la résolvante :

$$U_+(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iEt/\hbar} i\hbar G(E+i\eta) \quad (375)$$

$$= -\frac{e^{-\eta t/\hbar}}{2i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-i(E+i\eta)t/\hbar} G(E+i\eta). \quad (376)$$

On reconnaît une intégrale curviligne dans le plan complexe, le long de la droite $z(E) = E+i\eta$ parallèle à l'axe réel et dans le demi-plan supérieur. Traditionnellement, on oriente le chemin suivi, appelé C_+ ,

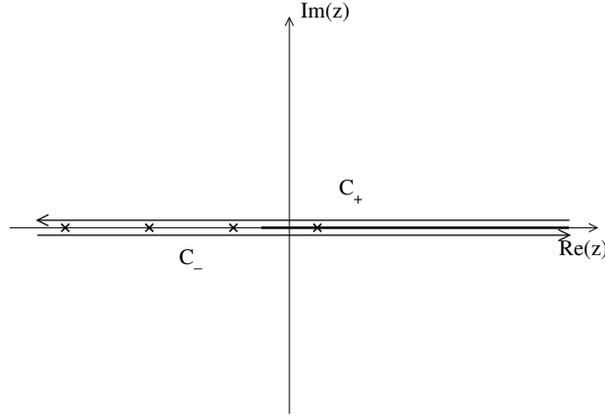


FIGURE 5 – Chemins orientés C_+ et C_- dans le plan complexe intervenant dans l'expression intégrale (380) de l'opérateur d'évolution en fonction de la résolvante.

dans le sens des E décroissants, comme indiqué sur la figure 5. Comme $G(z)$ est analytique dans le demi-plan supérieur, on peut en fait déformer ou déplacer C_+ librement dans le demi-plan supérieur. On fait maintenant $\eta \rightarrow 0^+$ pour obtenir le résultat central :

$$U_+(t) = \int_{C_+} \frac{dz}{2i\pi} e^{-izt/\hbar} G(z). \quad (377)$$

Le raisonnement précédent s'étend directement à la fonction de Green avancée :

$$U_-(t) = -Y(-t)U(t). \quad (378)$$

La transformée de Fourier vaut :

$$\text{TF}[U_-](E) = i\hbar G(E - i\eta). \quad (379)$$

En effectuant la transformée de Fourier inverse et en la soustrayant à la relation (377), on obtient l'expression générale valable à temps quelconque :

$$U(t) = \int_{C_+ \cup C_-} \frac{dz}{2i\pi} e^{-izt/\hbar} G(z), \quad (380)$$

où le chemin C_- dans le demi-plan inférieur est orienté dans le sens des énergies croissantes, comme indiqué sur la figure 5.

Une application importante de la relation (377) est la mise en évidence de contributions décroissant exponentiellement aux temps longs dans l'opérateur d'évolution, en particulier dans l'amplitude de probabilité $\langle \phi | U(t) | \phi \rangle$ de trouver le système dans son état initial $|\phi\rangle$ après évolution pendant $t > 0$. Pour cela, on effectue d'abord un prolongement analytique de la résolvante à travers sa ligne de coupure du demi-plan supérieur au demi-plan inférieur : comme indiqué sur la figure 4, la nouvelle ligne

de coupure est verticale. On considère ensuite l'intégrale suivante sur le chemin fermé indiqué sur la figure 6 :

$$I = \frac{1}{2i\pi} \left[\int_{C_+} dz f(z) + \int_{QC_g} dz f(z) + \int_{L_g} dz f(z) + \int_{L_d} dz f_a(z) + \int_{QC_d} dz f_a(z) \right]. \quad (381)$$

On a introduit les notations

$$f(z) = e^{-izt/\hbar} \langle \phi | G(z) | \phi \rangle \quad (382)$$

$$f_a(z) = e^{-izt/\hbar} \langle \phi | G_a(z) | \phi \rangle \quad (383)$$

où $G_a(z)$ est donc le prolongement analytique de $G(z)$ mentionné ci-dessus. L'intégrale sur C_+ fait apparaître l'opérateur $U_+(t)$. Les notations QC_g et QC_d indiquent deux quarts de cercle (gauche et droit) dont on fait tendre le rayon vers l'infini; on suppose ici que les intégrales correspondantes tendent vers zéro dans cette limite, mais il est prudent de le vérifier explicitement sur chaque cas particulier. Les notations L_g et L_d désignent les deux composantes (à gauche et à droite) du lacet emprunté pour contourner la nouvelle ligne de coupure; les contributions correspondantes ne sont pas opposées en général, car $f(z) \neq f_a(z)$, aussi la contribution du lacet n'est-elle en général pas nulle et peut donner aux temps longs des termes décroissant en lois de puissance avec t , qui sont des corrections (habituellement négligées et négligeables) à la décroissance exponentielle à venir [8]. Comme le chemin d'intégration considéré ne franchit aucune ligne de coupure, on peut appliquer le théorème des résidus :

$$I = \sum_{E_i} \text{Res}[f(z), z = E_i] + \sum_{z_0} \text{Res}[f_a(z), z = z_0]. \quad (384)$$

La première somme est la somme des résidus sur les pôles de $G(z)$ correspondant au spectre discret de H ; elle donne naissance à des termes oscillants dans $U_+(t)$. Le résidu en $z = E_i$, dans le cas non dégénéré, vaut simplement $|\langle \phi_i | \phi \rangle|^2 \exp(-iE_i t/\hbar)$ comme on pouvait s'y attendre. La seconde somme porte sur les pôles z_0 de $G_a(z)$, qui se trouvent dans le demi-plan inférieur; en décomposant en partie réelle et partie imaginaire,

$$z_0 = E_0 - i\hbar\Gamma_0/2 \quad (385)$$

avec $\Gamma_0 > 0$, on voit que le résidu correspondant décroît exponentiellement pour $t > 0$:

$$e^{-iz_0 t/\hbar} = e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-\Gamma_0 t/2}. \quad (386)$$

On voit donc, de façon très générale, que la présence d'un continuum dans le spectre de H peut faire apparaître des composantes dans l'opérateur d'évolution qui décroissent exponentiellement en temps, de manière « irréversible ».

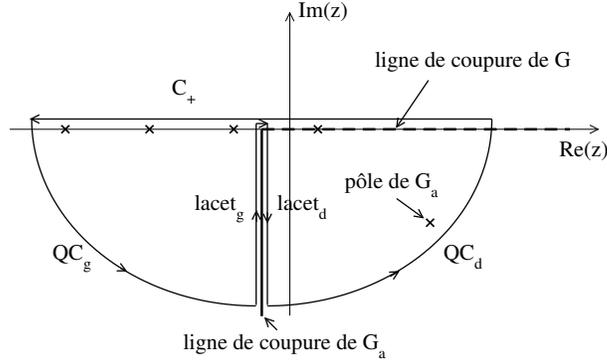


FIGURE 6 – Contour d’intégration utilisé pour faire apparaître la contribution des pôles du prolongement analytique $G_a(z)$ de la résolvante à l’opérateur d’évolution. La ligne de coupure de $G(z)$ est représentée en tireté, car c’est maintenant la ligne de coupure de $G_a(z)$ qui importe.

4.3.3 Développement perturbatif de $G(z)$

Une autre application possible de l’expression (377) est de revisiter l’équation intégrale (348) sur l’opérateur d’évolution. Quel est son équivalent pour la résolvante? Plaçons-nous à $t > 0$, et remplaçons tous les U , U_0 par les fonctions de Green retardées. Ceci permet d’étendre l’intégration sur τ à toute la droite réelle :

$$U_+(t) = U_{0+}(t) + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau U_{0+}(t-\tau) V U_+(\tau). \quad (387)$$

On reconnaît alors un produit de convolution. Comme $\text{TF}[f * g] = \text{TF}[f]\text{TF}[g]$, où $*$ désigne le produit de convolution, on obtient par application de la transformée de Fourier (et simplification par un facteur $i\hbar$) :

$$G(E + i\eta) = G_0(E + i\eta) + G_0(E + i\eta) V G(E + i\eta). \quad (388)$$

Or cette relation peut se déduire de façon purement algébrique, et pour un z (presque) quelconque, pas seulement pour $z = E + i\eta$. En effet, pour deux opérateurs A et B inversibles :

$$\frac{1}{A} = \frac{1}{B} + \frac{1}{B}(B - A)\frac{1}{A}. \quad (389)$$

Il suffit alors de poser

$$A = z - H \quad (390)$$

$$B = z - H_0. \quad (391)$$

Pour z nombre complexe n’appartenant ni au spectre de H ni au spectre de H_0 , on en déduit que

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z) V G(z). \quad (392)$$

On obtient de façon similaire :

$$G(z) = G_0(z) + G(z)VG_0(z), \quad (393)$$

en prenant $A = z - H_0$ et $B = z - H$. Ceci permet d'effectuer très simplement le développement de $G(z)$ en puissances de V :

$$G = G_0 + G_0VG_0 + G_0VG_0VG_0 + \dots = G_0 \sum_{n=0}^{+\infty} (VG_0)^n. \quad (394)$$

À ce stade, une philosophie possible, pour aller au-delà d'une approche perturbative élémentaire, est de resommer un nombre infini de termes de cette série (à défaut de pouvoir tout resommer). En pratique, on associe aux termes perturbatifs des diagrammes, et l'on cherche à resommer une certaine classe de diagrammes. Par exemple, pour un atome à deux niveaux f, e couplé au rayonnement quantique par un couplage dipolaire électrique $V = -\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}$, on pourra resommer tous les diagrammes de la figure 7a, les seuls à apparaître dans l'approximation du champ tournant, mais on négligera les diagrammes de la figure 7b, qui existent mais sont non résonnants.

Effectuons explicitement la resommation de tous les diagrammes de la figure 7a, dans le calcul de l'élément de matrice $\langle e, 0 | G(z) | e, 0 \rangle$, l'état $|e, 0\rangle$ représentant l'atome dans le niveau excité en présence du vide du rayonnement. Comme V change le nombre de photons d'une unité, on constate que seules les puissances paires de V de (394) donnent une contribution non nulle à l'élément de matrice, si bien que

$$\langle e, 0 | G(z) | e, 0 \rangle = \frac{1}{z - E_0^0} \sum_{n=0}^{+\infty} \langle e, 0 | (VG_0VG_0)^n | e, 0 \rangle \quad (395)$$

où E_0^0 est l'énergie non perturbée de l'état initial $|e, 0\rangle$. Le fait de garder seulement les diagrammes de la forme représentée sur la figure 7a revient à supposer que le système « revient » dans l'état initial $|e, 0\rangle$ après chaque action de VG_0VG_0 :

$$\langle e, 0 | G(z) | e, 0 \rangle \simeq \frac{1}{z - E_0^0} \sum_{n=0}^{+\infty} (\langle e, 0 | VG_0VG_0 | e, 0 \rangle)^n \quad (396)$$

$$\simeq \frac{1}{z - E_0^0 - \langle e, 0 | VG_0(z) V | e, 0 \rangle}, \quad (397)$$

où l'on a donc resommé une série géométrique. L'approximation correspondante sur l'élément de matrice de $G(z)$, donc de l'opérateur d'évolution $U(t)$, est non perturbative, elle n'est *a priori* pas limitée aux temps courts $\Gamma_0 t \ll 1$, cependant sa prédiction sur la valeur du pôle z_0 de $G_a(z)$ ne sera pas exacte (en dehors du cadre de l'approximation du champ tournant). Il est donc nécessaire d'estimer la contribution des diagrammes négligés, comme celui de la figure 7b, ou d'utiliser une approche plus systématique basée sur l'existence d'un petit paramètre. L'outil répondant à ce besoin est présenté dans la section 4.4.

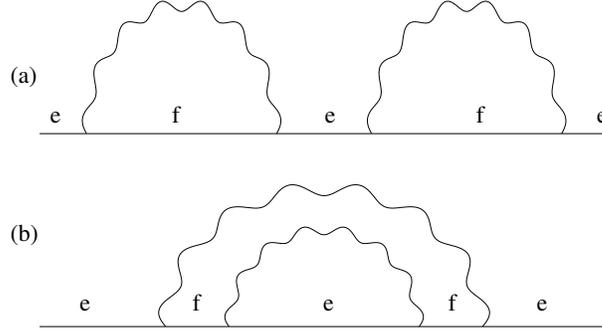


FIGURE 7 – Diagrammes apparaissant dans le développement perturbatif de $\langle e, 0 | G(z) | e, 0 \rangle$ dans le cas d'un atome à deux niveaux couplé de façon dipolaire électrique au champ quantique. Chaque ligne ondulée correspond à un photon. L'état $|e, 0\rangle$ représente l'atome dans le niveau excité en l'absence de rayonnement.

4.4 La méthode des projecteurs

Nous présentons ici une méthode permettant d'effectuer des approximations non perturbatives sur la résolvante, donc sur l'opérateur d'évolution.

4.4.1 Équation fondamentale sur $PG(z)P$

On introduit un projecteur orthogonal (hermitien) P qui commute avec l'hamiltonien non perturbé H_0 . Le projecteur supplémentaire est noté $Q = 1 - P$, il commute aussi avec H_0 . En pratique, P projette sur un sous-espace propre de H_0 , mais ce n'est pas nécessaire pour ce qui suit. Le résultat central est la formule

$$PG(z)P = \frac{P}{zP - H_{\text{eff}}(z)}, \quad (398)$$

où l'opérateur $H_{\text{eff}}(z)$ vaut

$$H_{\text{eff}}(z) = PHP + PVQ \frac{Q}{zQ - QHQ} QVP. \quad (399)$$

Dans ces expressions, l'inverse des opérateurs s'entend dans le sous-espace sur lequel P projette, pour l'équation (398), ou dans le sous-espace sur lequel Q projette, dans le cas de (399). Nous ne suivrons pas ici la tradition d'écrire au dénominateur z au lieu de zP ou zQ .

L'appellation d'« hamiltonien effectif » pour H_{eff} est naturelle, puisque $PG(z)P$ a la forme d'une résolvante d'un hamiltonien H_{eff} pour l'évolution du système à l'intérieur du sous-espace sur lequel P projette. Il faut noter cependant que l'évolution ainsi restreinte n'est plus unitaire (la probabilité de présence dans l'espace sur lequel P projette n'est pas une constante du mouvement). Ainsi, H_{eff} n'est en général pas hermitien. De plus, H_{eff} dépend de z , ce qui rend son interprétation physique délicate.

En se limitant au cas $z = E + i\eta$, $\eta \rightarrow 0^+$, pertinent pour le calcul de $PU_+(t)P$, et pour simplifier au cas où le spectre de QHQ est purement continu, on constate qu'en général, H_{eff} comporte une partie hermitienne et une partie antihermitienne, en plus de la contribution intuitive PHP :

$$H_{\text{eff}}(E + i\eta) = PHP + \hbar\Delta(E) - \frac{i\hbar}{2}\Gamma(E). \quad (400)$$

Les opérateurs Δ et Γ représentent respectivement l'effet réactif et l'effet dissipatif du couplage V sur l'évolution à l'intérieur du sous-espace sur lequel P projette. À partir des formes « explicites » suivantes,

$$\hbar\Delta(E) = PVQ \text{v.p.} \frac{Q}{EQ - QHQ} QVP \quad (401)$$

$$\Gamma(E) = \frac{2\pi}{\hbar} PVQ \delta(EQ - QHQ) QVP, \quad (402)$$

on voit que l'opérateur Γ est positif, et que Δ est la transformée de Hilbert de Γ :

$$\Delta(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE'}{2\pi} \text{v.p.} \frac{1}{E - E'} \Gamma(E'). \quad (403)$$

Notons que cette notion d'hamiltonien effectif est omniprésente en physique, même si l'on n'en est pas toujours conscient. Considérons en physique atomique l'exemple de l'interaction de van der Waals entre deux atomes, qui inclut (à part l'interaction coulombienne) l'effet du couplage au rayonnement quantique. On prend alors pour P le projecteur sur le sous-espace où les deux atomes sont dans l'état fondamental et le champ est dans l'état vide, sous-espace propre de H_0 de dimension un dont on prend l'énergie comme origine des énergies. On voit que le sous-espace sur lequel Q projette est séparé en énergie non perturbée typiquement de ΔE , l'énergie d'excitation d'un atome. Si l'on se place dans le cas de collisions entre atomes à basse énergie cinétique, on peut négliger E devant ΔE , donc devant QHQ au dénominateur, et prendre $\Delta(E) \simeq \Delta(0)$, $\Gamma(E) \simeq \Gamma(0) = 0$: en première approximation, H_{eff} devient un honnête hamiltonien hermitien indépendant de l'énergie. Le calcul du terme $\hbar\Delta(0)$, effectué à l'ordre pertinent en V (ordre 4 pour le couplage dipolaire électrique) conduit au potentiel d'interaction de van der Waals, qui n'est donc autre qu'un potentiel d'interaction effectif de basse énergie.³

On a l'habitude de représenter le développement de H_{eff} en puissances de V par des diagrammes similaires à ceux de la section 4.3.3, voir la figure 7. Une différence importante est que les diagrammes associés à H_{eff} doivent seulement comporter des états propres de H_0 intermédiaires orthogonaux au sous-espace sur lequel P projette. Ils sont donc bien moins nombreux. Par exemple, dans le cas de

3. En toute rigueur, il ne faudrait pas remplacer E par zéro mais par l'énergie exacte (perturbée par le couplage au rayonnement) E_∞ des atomes infiniment séparés. En pratique, l'interaction de van der Waals est obtenue en développant la fonction $\Delta(0)$ au premier ordre donnant une dépendance en la distance entre les atomes, à l'ordre 4 en le couplage dipolaire électrique V comme nous l'avons dit. Dans ce terme dominant dépendant de la distance entre les atomes, on peut à cet ordre remplacer E_∞ par son approximation d'ordre zéro en V , c'est-à-dire zéro.

l'atome à deux niveaux initialement dans l'état excité en présence du vide de rayonnement, les diagrammes de la classe de la figure 7a doivent maintenant comporter seulement un cycle émission-réabsorption d'un photon, au lieu d'un nombre quelconque, et on arrive directement à la forme (397) sans avoir à sommer de série géométrique. Ceci illustre bien le fait qu'une approximation perturbative sur H_{eff} constitue une approximation non perturbative sur $PG(z)P$, resommant automatiquement un nombre infini de termes dans le développement de PGP en puissances de V .

Passons maintenant à l'établissement du résultat (398). Multiplions l'identité

$$(z - H)G(z) = 1 \quad (404)$$

à droite par P , à gauche par P ou par Q . On obtient deux équations :

$$P(z - H)G(z)P = P \quad (405)$$

$$Q(z - H)G(z)P = 0 \quad (406)$$

car $P^2 = P$ et $QP = 0$. Injectons ensuite la relation de fermeture $P + Q = 1$ immédiatement à la gauche de $G(z)$. Comme $PH_0Q = QH_0P = 0$, on obtient

$$P(z - H)PPG(z)P - PVQQG(z)P = P \quad (407)$$

$$Q(z - H)QQG(z)P - QVPPG(z)P = 0. \quad (408)$$

Utilisons la seconde équation pour éliminer $QG(z)P$ dans la première :

$$QG(z)P = \frac{Q}{zQ - QHQ} QVPPG(z)P, \quad (409)$$

ce qui, après report dans (407), donne le résultat recherché.

4.4.2 Ébauche de lien avec l'approche diagrammatique à N corps

Dans l'étude du problème à N corps, à température nulle, avec la méthode de Feynman et Dyson, on introduit la fonction de Green

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = (i\hbar)^{-1} \langle \psi_0 | T[\hat{\psi}(\mathbf{r}, t)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t')] | \psi_0 \rangle, \quad (410)$$

où $|\psi_0\rangle$ est l'état fondamental du problème à N corps, $\hat{\psi}$ et $\hat{\psi}^\dagger$ sont les opérateurs de champ considérés en point de vue de Heisenberg, et T est l'opérateur « T-produit » qui range les facteurs dans l'ordre chronologique (du temps le plus court tout à droite au temps le plus long tout à gauche), et multiplie le résultat par la signature de la permutation correspondante si le champ $\hat{\psi}$ est fermionique. Pour un système homogène spatialement (dans une boîte cubique avec des conditions aux limites périodiques), on effectue une transformée de Fourier spatio-temporelle⁴ et l'on introduit l'équation de

4. Comme la fonction de Green est alors prise dans un état stationnaire invariant par translation spatiale, elle ne dépend que de la différence des temps $t - t'$ et des positions $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, et sa transformée de Fourier ne fait intervenir qu'une seule pulsation ω et un seul vecteur d'onde \mathbf{k} .

Dyson

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}^0 - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)} \quad (411)$$

où $\epsilon_{\mathbf{k}}^0$ est l'énergie non perturbée du mode de vecteur d'onde \mathbf{k} et $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ est par définition la fonction énergie propre ("self-energy" en anglais). L'intérêt de cette écriture est que le développement perturbatif de $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ en l'interaction, qui conduit à une approximation non perturbative de la fonction de Green, s'effectue en sommant une classe bien identifiée de diagrammes de Feynman, des diagrammes « irréductibles », voir l'ouvrage d'Alexander Fetter et John Walecka dans la bibliographie.

Avec notre formalisme nous pouvons aboutir à une écriture similaire à (411) en considérant la fonction de Green retardée

$$\mathcal{G}^{\text{ret}}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = (i\hbar)^{-1} \langle \psi_0 | \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t') | \psi_0 \rangle Y(t - t'), \quad (412)$$

où Y est la fonction de Heaviside. La transformée de Fourier spatio-temporelle conduit à

$$\mathcal{G}^{\text{ret}}(\mathbf{k}, \omega) = \langle \psi_0 | a_{\mathbf{k}} G(E_0 + \hbar\omega + i\eta) a_{\mathbf{k}}^\dagger | \psi_0 \rangle, \quad (413)$$

où $a_{\mathbf{k}}$ annihile une particule de vecteur d'onde \mathbf{k} . Choisissons comme projecteur

$$P = \frac{|\phi_+\rangle\langle\phi_+|}{\|\phi_+\|^2} \quad \text{avec} \quad |\phi_+\rangle = a_{\mathbf{k}}^\dagger |\psi_0\rangle. \quad (414)$$

Ce projecteur ne commute pas avec H_0 , mais le formalisme des $PG(z)P$ est aisément généralisable à ce cas, et conduit alors à une expression à la Dyson,

$$\langle \phi_+ | G(z) | \phi_+ \rangle = \frac{\langle \phi_+ | \phi_+ \rangle}{z - h_+(z)} \quad (415)$$

où l'on a introduit la fonction de z à valeurs complexes $h_+(z)$ telle que $H_{\text{eff}}(z) = Ph_+(z)$.

Le lecteur curieux pourra établir le lien complet de notre formalisme avec celui de Feynman-Dyson *via* la relation, donnée ici pour un champ fermionique :

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega) = \langle \phi_+ | G(E_0 + \hbar\omega + i\eta) | \phi_+ \rangle - \langle \phi_- | G(E_0 - \hbar\omega + i\eta) | \phi_- \rangle \quad (416)$$

avec $|\phi_-\rangle = a_{\mathbf{k}} |\psi_0\rangle$. On pourra noter que $\langle \phi_+ | \phi_+ \rangle + \langle \phi_- | \phi_- \rangle = 1$ pour des fermions. Dans la limite $\omega \rightarrow \infty$, en supposant que Σ , h_+ et h_- sont négligeables devant $\hbar\omega$, on trouve ainsi bien que les deux membres de (416) sont équivalents à $1/\hbar\omega$.

4.4.3 Cas d'un spectre purement discret

Dans le cas où H_0 et H ont un spectre purement discret, la méthode des projecteurs est un outil efficace pour un calcul perturbatif des valeurs propres de H , comme ici brièvement illustré (méthode de Wigner-Brillouin). Comme la valeur propre E_0 de H , de vecteur propre associé $|\phi_0\rangle$, est un pôle de

la résolvante, on voit que c'est un aussi un pôle de $PG(z)P$ si $P|\phi_0\rangle \neq 0$; ainsi E_0 doit être une valeur propre de $H_{\text{eff}}(E_0)$ donc doit être une solution de l'équation implicite

$$\det[EP - H_{\text{eff}}(E)] = 0. \quad (417)$$

Une application simple est obtenue dans le cas où P projette sur un vecteur propre $|\phi_0^0\rangle$ de valeur propre E_0^0 non dégénérée :

$$P = |\phi_0^0\rangle\langle\phi_0^0|. \quad (418)$$

Dans ce cas, H_{eff} est une matrice 1×1 , et E_0 est solution de

$$E_0 = E_0^0 + \langle\phi_0^0|V|\phi_0^0\rangle + \langle\phi_0^0|V\frac{Q}{E_0 - QH_0Q}V|\phi_0^0\rangle. \quad (419)$$

Il est facile d'en extraire un développement de E_0 en puissances de V . Par exemple, à l'ordre deux en V , on peut négliger QVQ et remplacer E_0 par E_0^0 au dénominateur :

$$E_0 = E_0^0 + \langle\phi_0^0|V|\phi_0^0\rangle + \langle\phi_0^0|V\frac{Q}{E_0^0 - QH_0Q}V|\phi_0^0\rangle + O(V^3), \quad (420)$$

résultat bien connu de la théorie des perturbations au second ordre dans le cas non dégénéré. On voit bien, cependant, que le présent formalisme permet très facilement d'aller à des ordres plus élevés et de traiter le cas dégénéré.

4.4.4 Un état discret couplé à un continuum

Pour faire simple, considérons le cas d'un état discret $|\phi_0^0\rangle$ couplé à des états formant un pur continuum. On prend P égal au projecteur sur $|\phi_0^0\rangle$; le spectre de QH_0Q est alors purement continu. On suppose de plus que $PVP = 0$. Ce cadre correspond au cas d'un atome à deux niveaux couplé au vide du rayonnement dans l'approximation du champ tournant, l'état discret étant l'atome dans l'état excité en présence du vide, le continuum étant l'atome dans l'état fondamental en présence d'un photon. En l'absence de couplage V , la résolvante $G_0(z)$ présente un pôle en $z = E_0^0$ et une ligne de coupure, voir la figure 8a. En présence du couplage V , la résolvante $G(z)$ présente seulement une ligne de coupure (l'état discret s'est dilué dans le continuum), mais il reste une trace de l'état discret sous la forme d'un pôle dans $G_a(z)$, prolongement analytique de la résolvante à travers la ligne de coupure de $G(z)$; le pôle est situé en $z = E_0 - i\hbar\Gamma_0/2$.

On applique le formalisme de la section 4.4.1. Ici $\Gamma(E)$ et $\Delta(E)$ sont des matrices 1×1 , donc on les traite comme des fonctions à valeurs réelles. À partir de l'expression (380) de l'opérateur d'évolution, en regroupant les contributions des chemins C_+ et C_- , on obtient l'écriture exacte

$$\langle\phi_0^0|U(t)|\phi_0^0\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{\pi} e^{-iEt/\hbar} \frac{\eta + \hbar\Gamma(E)/2}{[E - E_0^0 - \hbar\Delta(E)]^2 + [\eta + \hbar\Gamma(E)/2]^2}. \quad (421)$$

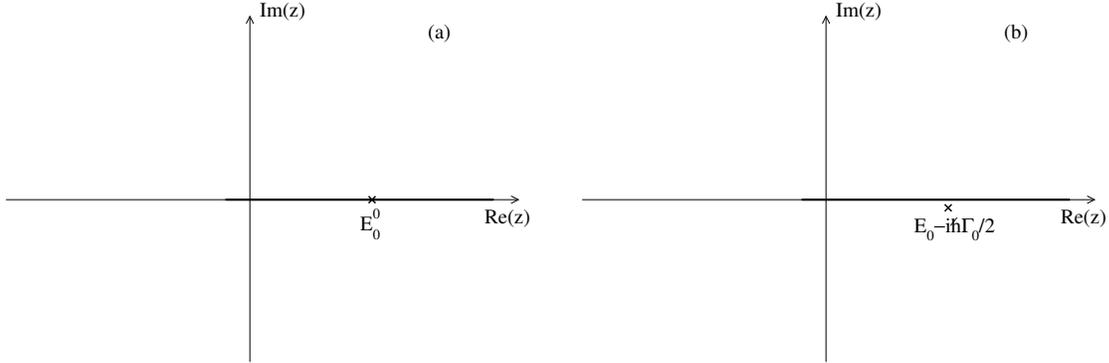


FIGURE 8 – Dans le cas d'un état discret couplé à un continuum, propriétés analytiques de la résolvante $G_0(z)$ de l'hamiltonien non perturbé H_0 (a) et de la résolvante $G(z)$ de l'hamiltonien complet $H = H_0 + V$ (b). Sous l'effet de V , l'état discret, pôle dans (a), se dilue dans le continuum et donne naissance dans (b) à un pôle du prolongement analytique $G_a(z)$ de la résolvante.

Ceci est comme la transformée de Fourier d'une lorentzienne, mais avec une largeur et une position de la raie qui dépendent de l'énergie.

Voyons quelques approximations couramment utilisées sur cette expression exacte. En cas de couplage V assez faible, on peut s'attendre à ce que $\Gamma(E)$ et $\Delta(E)$ soient faibles. Si $\Gamma(E)$ est faible, la pseudo-lorentzienne est étroite et l'on peut négliger la dépendance en E de Γ et Δ . Si le déplacement de la raie $\Delta(E)$ est assez faible, on peut supposer que

$$\Gamma(E) \simeq \Gamma(E_0^0) \quad (422)$$

$$\Delta(E) \simeq \Delta(E_0^0). \quad (423)$$

Cette approximation s'appelle approximation du pôle, et conduit à

$$\langle \phi_0^0 | U(t) | \phi_0^0 \rangle \simeq e^{-iE_0^0 t/\hbar} e^{-i\Delta(E_0^0)t} e^{-\Gamma(E_0^0)t/2}. \quad (424)$$

Une condition de validité de (424) est que l'échelle de variation en énergie de $\Gamma(E)$ et de $\Delta(E)$ soit beaucoup plus grande que $\hbar\Gamma(E_0^0)$ et que $\hbar\Delta(E_0^0)$. En particulier, ceci impose

$$|\Gamma(E_0^0 + \hbar\Gamma(E_0^0)) - \Gamma(E_0^0)| \ll \Gamma(E_0^0), \quad (425)$$

soit, en développant au premier ordre en $\Gamma(E_0^0)$:

$$\left| \hbar \frac{d\Gamma}{dE}(E_0^0) \right| \ll 1. \quad (426)$$

On parle de condition de continuum large, la dépendance en E de Γ incluant la dépendance en énergie de la densité d'états $\rho_Q(E)$ du continuum de QH_0Q . Bien sûr, la dépendance en E de $\Gamma(E)$ inclut aussi celle des éléments de matrice de V , qui est en général assez douce effectivement.

Traditionnellement, lorsque V est assez faible, on termine le calcul en évaluant les fonctions $\Gamma(E)$ et $\Delta(E)$ au second ordre en V :

$$\Gamma(E) \simeq \frac{2\pi}{\hbar} \int dk |\langle \phi_0^0 | V | \psi_k^0 \rangle|^2 \delta(E - E_k^0) \quad (427)$$

$$\hbar\Delta(E) \simeq \int dk |\langle \phi_0^0 | V | \psi_k^0 \rangle|^2 \text{v.p.} \frac{1}{E - E_k^0}. \quad (428)$$

On constate alors que $\Gamma(E_0^0)$ coïncide avec la règle d'or de Fermi (le lecteur attentif aura d'ailleurs reconnu dans (426) une condition de validité de la règle d'or). Quant à $\hbar\Delta(E_0^0)$, il est donné par ce qui est finalement la théorie des perturbations au second ordre dans le cas non dégénéré, généralisée au cas d'un spectre continu (il suffit de remplacer dans la formule habituelle la somme par une intégrale, et d'ajouter une valeur principale pour régulariser la divergence).

Une illustration simple est donnée par l'émission spontanée de l'atome à deux niveaux, initialement dans l'état excité en présence du vide du rayonnement, avec un couplage dipolaire électrique au champ quantique. Les approximations précédentes (approximation du pôle et calcul de $\Gamma(E)$ au second ordre en V) conduisent à l'expression connue du taux d'émission spontanée :

$$\Gamma \simeq \frac{d^2 \omega_0^3}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} \quad (429)$$

où d est le moment dipolaire électrique. La condition de validité déduite de (426) est donc

$$\frac{d\Gamma}{d\omega_0} = \frac{d^2 \omega_0^2}{\pi\epsilon_0 \hbar c^3} \ll 1. \quad (430)$$

Pour l'atome d'hydrogène, $d \approx qa_0$ et $\hbar\omega_0 \approx q^2/(4\pi\epsilon_0 a_0)$ où q est la charge de l'électron et a_0 est le rayon de Bohr, si bien que

$$\frac{d\Gamma}{d\omega_0} \approx \alpha^3 \quad (431)$$

avec $\alpha = q^2/(4\pi\epsilon_0 \hbar c) \simeq 1/137$ la constante de structure fine.

Pour terminer, donnons un point de vue légèrement différent sur l'approximation du pôle, qui montre bien qu'elle repose sur une hypothèse de variation faible en énergie de l'hamiltonien effectif. On part de l'écriture exacte du prolongement analytique de $PG(z)P$ du demi-plan supérieur au demi-plan inférieur,

$$\langle \phi_0^0 | G_a(z) | \phi_0^0 \rangle = \frac{1}{z - h_a(z)}. \quad (432)$$

Dans l'expression (384), le pôle z_0 contribue par le résidu

$$\text{Res}[\langle \phi_0^0 | f_a(z) | \phi_0^0 \rangle, z = z_0] = \frac{e^{-iz_0 t/\hbar}}{1 - h'_a(z_0)}. \quad (433)$$

À l'instant initial $t = 0$, $\langle \phi_0^0 | U(t) | \phi_0^0 \rangle = 1$ donc la contribution (433) du résidu peut être considérée comme dominante à $\langle \phi_0^0 | U(t) | \phi_0^0 \rangle$, par rapport à la contribution du lacet, seulement si

$$|h'_a(z_0)| \ll 1, \quad (434)$$

auquel cas on peut se contenter de l'approximation (pour $t > 0$ pas trop long) :

$$\langle \phi_0^0 | U(t) | \phi_0^0 \rangle \simeq e^{-iz_0 t / \hbar}. \quad (435)$$

On retrouve bien une condition de faible dérivée, ce qui donne aussi l'idée d'approximer z_0 par E_0^0 : on a de manière exacte

$$z_0 = h_a(z_0) \quad (436)$$

mais si h_a varie lentement au voisinage de z_0 , on peut à l'ordre zéro en h' remplacer z_0 par E_0^0 au second membre, pour obtenir

$$z_0 \simeq h_a(E_0^0), \quad (437)$$

ce qui est l'approximation du pôle.

4.4.5 Un modèle exactement soluble

Considérons le modèle de Wigner et Weisskopf d'un état discret $|e\rangle$ d'énergie nulle couplé à un pseudo-continuum formé de barreaux d'échelle régulièrement espacés d'une énergie δ , s'étendant de $-\infty$ à $+\infty$. Pour simplifier, on prend un couplage d'amplitude ν constante réelle entre l'état discret et chaque barreau de l'échelle, si bien que

$$H_0 = \sum_{n \in \mathbb{Z}} n \delta |n\rangle \langle n| \quad (438)$$

$$V = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \nu |e\rangle \langle n| + \text{h.c.} \quad (439)$$

La méthode des projecteurs permet d'étudier très rapidement ce modèle. Prenons

$$P = |e\rangle \langle e|. \quad (440)$$

Alors $PVP = 0$ et surtout $QVQ = 0$, ce qui permet de calculer exactement l'inverse de $zQ - QHQ$ dans l'expression (399) de H_{eff} . On trouve finalement que

$$\langle e | G(z) | e \rangle = \frac{1}{z - \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{\nu^2}{z - n\delta}} = \frac{1}{z - \pi \tilde{\nu}^2 \cotan(\pi z / \delta)}, \quad (441)$$

en posant $\tilde{\nu}^2 = \nu^2 / \delta$ et en utilisant la relation classique d'analyse complexe

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{z - n} = \pi \cotan \pi z. \quad (442)$$

Dans le cas de δ non nul, le spectre est discret et les énergies propres annulent le dénominateur de (441). Par discussion graphique, on trouve qu'il y a une et une seule valeur propre par intervalle $]n\delta, (n+1)\delta[$. On passe à la limite continue en faisant $\delta \rightarrow 0$ à $\tilde{\nu}$ fixé. Pour $\text{Im } z > 0$, on trouve alors que

$$\langle e|G(z)|e \rangle \rightarrow \frac{1}{z + i\hbar\Gamma/2} \quad (443)$$

et pour $\text{Im } z < 0$, que

$$\langle e|G(z)|e \rangle \rightarrow \frac{1}{z - i\hbar\Gamma/2} \quad (444)$$

avec $\hbar\Gamma/2 = \pi\tilde{\nu}^2$, ce qui est exactement le taux de décroissance de e donné par la règle d'or de Fermi. On voit que $\langle e|G(z)|e \rangle$ a une ligne de coupure sur tout l'axe réel, et que le prolongement analytique du demi-plan supérieur au demi-plan inférieur,

$$\langle e|G_a(z)|e \rangle = \frac{1}{z + i\hbar\Gamma/2}, \quad (445)$$

admet un pôle en $z_0 = -i\hbar\Gamma/2$. Dans le cadre de ce modèle, la ligne de coupure sur $\langle e|G(z)|e \rangle$ n'a pas de bout et on peut la faire disparaître complètement par prolongement analytique, aussi la décroissance de la population dans e est-elle exactement exponentielle.

Pour terminer, constatons sur un exemple numérique que la population dans e , initialement égale à un, n'a pas une décroissance « irréversible » si δ a une valeur non nulle, mais présente d'intéressantes résurgences, voir la figure 9.

4.5 Théorie de la diffusion

Un autre exemple d'application de la résolvante est la théorie de la diffusion, dans laquelle on considère la diffusion d'une onde par un potentiel $V(\mathbf{r})$ à courte portée. Dans le cas de la mécanique quantique, ceci correspond à l'hamiltonien $H = H_0 + V$, avec

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu} \quad \text{et} \quad V = V(\mathbf{r}), \quad (446)$$

et $V(\mathbf{r})$ tendant assez rapidement vers zéro pour $r \rightarrow +\infty$, mais le problème dépasse bien sûr ce cadre, et se pose aussi en optique, en acoustique, etc. Nous notons ici la masse μ , car le problème de diffusion quantique émane souvent de la diffusion de deux particules qui interagissent par V , et μ est alors la masse réduite (après séparation du centre de masse et du mouvement relatif). Le point clé d'un problème de diffusion est que l'onde est asymptotiquement libre, c'est-à-dire que le potentiel V a un effet négligeable lorsque $r \rightarrow +\infty$. C'est pour cette raison que l'énergie de l'onde associée à H_0 (ici l'énergie cinétique) est conservée entre les instants $t = -\infty$ et $t = +\infty$, l'énergie totale (éminemment conservée) se réduisant asymptotiquement à l'énergie de l'onde libre associée à H_0 .

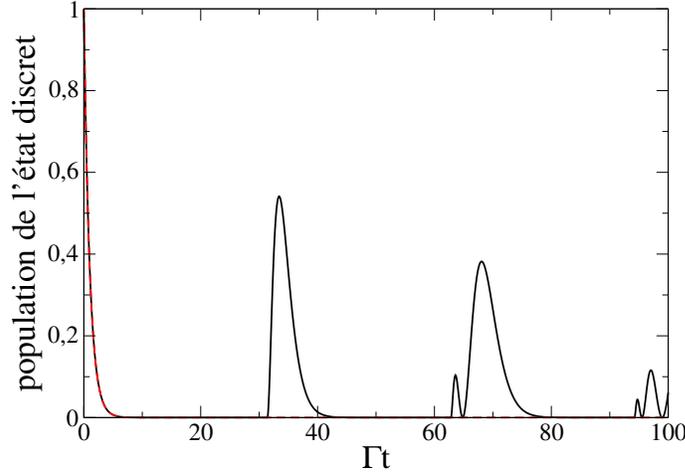


FIGURE 9 – Dans le modèle de Wigner et Weisskopf d'un état discret couplé à une échelle infinie δZ de niveaux d'énergie, décroissance et résurgences de la population dans l'état discret e lorsque δ n'est pas infinitésimal (ici $\delta/\Gamma = 0,2$). La courbe noire provient d'une évaluation numérique de la solution exacte, en sommant sur les résidus de $e^{-izt/\hbar} \langle e|G(z)|e \rangle$. La courbe rouge en tireté correspond à la fonction $t \mapsto e^{-\Gamma t}$ et reproduit remarquablement bien la décroissance de la population aux temps $\Gamma t < 20$.

En pratique, comme V s'annule à l'infini, on cherche les solutions d'énergie E positive de l'équation de Schrödinger $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, ce qui donne en représentation position :

$$E\psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}). \quad (447)$$

Cette équation est complétée par des conditions aux limites à l'infini correspondant à une expérience de diffusion d'un paquet d'ondes incident sur V : pour $r \rightarrow +\infty$, $\psi(\mathbf{r})$ doit être la somme de l'onde plane incidente et de l'onde diffusée purement sortante (c'est-à-dire avec un courant de probabilité s'éloignant de l'origine, de même sens que la direction d'observation). En dimension trois, ceci correspond aux conditions aux limites :

$$\psi(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow +\infty}{=} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) \frac{e^{ikr}}{r} + O(1/r^2) \quad (448)$$

où la direction d'observation est

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (449)$$

et $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})$ est l'amplitude de diffusion dans la direction \mathbf{n} . Comme les mesures dans les expériences de diffusion sont souvent faites dans le champ lointain $r \rightarrow +\infty$, le but de la théorie de la diffusion est essentiellement le calcul de cette amplitude, qui donne accès en particulier à la section efficace différentielle de diffusion

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})|^2 \quad (450)$$

où $d\Omega$ est l'élément d'angle solide.⁵ Ces solutions de l'équation de Schrödinger que nous sommes en train de considérer font partie d'un continuum s'étendant de 0 à $+\infty$, on les appelle états stationnaires de diffusion d'énergie E , avec clairement

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}. \quad (451)$$

4.5.1 Solution formelle du problème de diffusion

La solution formelle de l'équation de Schrödinger, avec les conditions aux limites désirées, est donnée très simplement en termes de la résolvante de l'hamiltonien total :

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = [1 + G(E + i\eta)V] |\psi_{\mathbf{k}}^0\rangle \quad (452)$$

où $\eta \rightarrow 0^+$ et $|\psi_{\mathbf{k}}^0\rangle$ est un état propre de l'hamiltonien non perturbé H_0 d'énergie E . Les conditions aux limites (448) correspondent au choix de l'onde plane de vecteur d'onde \mathbf{k} :

$$|\psi_{\mathbf{k}}^0\rangle = |\mathbf{k}\rangle \quad \text{avec} \quad \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (453)$$

Avant de vérifier que l'expression (452) convient, faisons le lien avec l'équation de Lippmann-Schwinger. En utilisant la relation (392) et en omettant l'argument $E + i\eta$ pour alléger l'écriture, on obtient :

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = (1 + GV)|\psi_{\mathbf{k}}^0\rangle = [1 + G_0V(1 + GV)]|\psi_{\mathbf{k}}^0\rangle \quad (454)$$

$$= |\psi_{\mathbf{k}}^0\rangle + G_0(E + i\eta)V|\psi_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (455)$$

Cette équation implicite sur $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ prend une forme intégrale en représentation position. Elle peut être obtenue intuitivement à partir de l'équation de Schrödinger écrite sous forme de l'équation libre avec terme source :

$$(E - H_0)|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = V|\psi_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (456)$$

On a alors envie de diviser par $E - H_0$, mais cet opérateur n'est pas inversible car $E \geq 0$. On régularise l'inverse en ajoutant $+i\eta$ à E , mais il reste la liberté de l'ajout d'une solution de l'équation homogène, qu'on choisit être l'onde incidente. Mathématiquement, en représentation position, ceci revient à utiliser la méthode des fonctions de Green.

5. Si le problème (447) provient de la diffusion de deux particules indiscernables, la formule (450) ne s'applique pas car elle oublie le fait que la fonction d'onde orbitale $\psi(\mathbf{r})$ doit être symétrique ($\epsilon = +1$) ou antisymétrique ($\epsilon = -1$) sous l'échange des positions des deux particules donc ici sous le changement de \mathbf{r} en $-\mathbf{r}$, voir la section 1.4; on a alors plutôt $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) + \epsilon f_{\mathbf{k}}(-\mathbf{n})|^2$. De plus, dans ce cas, la section efficace totale est l'intégrale de la section différentielle sur les angles solides prise dans un demi-espace seulement, les directions de détection \mathbf{n} et $-\mathbf{n}$ étant physiquement les mêmes et ne devant donc pas être comptées toutes les deux. Ce problème est traité dans les ouvrages habituels de mécanique quantique, voir par exemple celui de Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu et Franck Laloë ou celui d'Albert Messiah (section XIV-9).

Vérifions d'abord que l'expression (452) est un état propre de H d'énergie E . On forme pour cela :

$$\begin{aligned} (E + i\eta - H)|\psi_{\mathbf{k}}\rangle &= (E + i\eta - H_0 - V)|\psi_{\mathbf{k}}^0\rangle + V|\psi_{\mathbf{k}}^0\rangle \\ &= i\eta|\psi_{\mathbf{k}}^0\rangle. \end{aligned} \quad (457)$$

Ceci conduit au résultat quand $\eta \rightarrow 0^+$.

Voyons ensuite si l'expression (452) obéit aux conditions aux limites. Ceci a l'air difficile car on ne connaît en général pas les éléments de matrice de G , au contraire de ceux de G_0 . Le point clé est que V est à courte portée dans l'espace des positions, et que l'équation (392) permet de récrire la solution formelle en faisant apparaître G_0 comme dans (454) :

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = [1 + G_0(E + i\eta)T(E + i\eta)]|\psi_{\mathbf{k}}^0\rangle \quad (458)$$

où l'opérateur de transmission T , encore appelé matrice T , joue un rôle central dans la théorie de la diffusion :

$$T(z) = V + VG(z)V \quad z \in \mathbb{C} \setminus \text{Spec } H. \quad (459)$$

Il reste à calculer les éléments de matrice de $G_0(z)$ en représentation position, avec $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}^+$. À cause de l'invariance par translation spatiale de G_0 , on se ramène à :

$$\mathcal{G}_0(u) = \langle \mathbf{r} = \mathbf{u} | G_0(z) | \mathbf{r} = \mathbf{0} \rangle, \quad (460)$$

fonction seulement du module de \mathbf{u} par invariance par rotation de G_0 . L'équation $(z - H_0)G_0(z) = 1$ donne en représentation position :

$$\left(z + \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \right) \mathcal{G}_0(u) = \delta(\mathbf{u}). \quad (461)$$

Pour $u > 0$, l'équation se résout aisément en dimension trois, il suffit de poser $\mathcal{G}_0(u) = f(u)/u$ et

$$z = \frac{\hbar^2 k_c^2}{2\mu} \quad \text{avec } \text{Im } k_c > 0, \quad (462)$$

la condition sur la partie imaginaire de k_c le détermine de façon unique puisque z n'est pas un réel positif. Alors

$$f''(u) + k_c^2 f(u) = 0. \quad (463)$$

En éliminant la solution divergeant exponentiellement à l'infini, il reste

$$f(u) = Ae^{ik_c u}. \quad (464)$$

Au voisinage de $\mathbf{u} = 0$, on fait un calcul au sens des distributions, en utilisant en dimension trois l'équation de Poisson de l'électrostatique :

$$\Delta \frac{1}{u} = -4\pi\delta(\mathbf{u}), \quad (465)$$

ce qui détermine la constante A et donne

$$\mathcal{G}_0(u) = -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_c u}}{u}. \quad (466)$$

Dans le cas $z = E + i\eta$, $E \geq 0$ et $\eta \rightarrow 0^+$, on trouve que $k_c \rightarrow k$. Ainsi, en injectant une relation de fermeture dans l'espace des positions, et pour une onde plane incidente, l'équation (458) devient en représentation \mathbf{r} :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int d^3 r' \mathcal{G}_0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \langle \mathbf{r}' | T(E + i\eta) | \mathbf{k} \rangle. \quad (467)$$

Le fait que la matrice T soit à courte portée permet de calculer le comportement à grande distance de (467), simplement en effectuant un développement asymptotique de $\mathcal{G}_0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ à grand r à \mathbf{r}' fixé. Ceci est particulièrement clair dans le cas d'un potentiel diffuseur à support compact de portée b ($V(\mathbf{r}) = 0$ si $r > b$), l'intégrale sur \mathbf{r}' dans (467) pouvant être limitée à la boule de rayon b . Comme $(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 = r^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}' + r'^2$, on trouve dans la limite $r \gg b$:

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = r - \mathbf{n}\cdot\mathbf{r}' + O(b^2/r) \quad (468)$$

où la direction \mathbf{n} de \mathbf{r} a déjà été introduite dans (449). Si l'on insère ce développement dans l'expression de \mathcal{G}_0 , on constate que le $O(b^2/r)$ est négligeable dans le facteur de phase si

$$r \gg kb^2, \quad (469)$$

ce qui est plus contraignant que l'hypothèse $r \gg b$ si $kb > 1$. Notons que la condition (469) est bien connue en théorie de la diffraction en champ lointain en optique (diffraction de Fraunhofer).⁶ On obtient finalement si $r \rightarrow +\infty$:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3 r' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \left(\frac{-2\mu}{4\pi\hbar^2} \right) \langle \mathbf{r}' | T(E + i\eta) | \mathbf{k} \rangle + O\left(\frac{1}{r^2}\right). \quad (470)$$

Ceci obéit bien aux conditions aux limites désirées (448), et l'on obtient en prime l'expression de l'amplitude de diffusion en termes de la matrice T , que l'on peut écrire de façon compacte en reconnaissant dans l'intégrale sur \mathbf{r}' la fonction d'onde de l'onde plane de vecteur d'onde de $k\mathbf{n}$:

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) = -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} \langle k\mathbf{n} | T(E + i\eta) | \mathbf{k} \rangle. \quad (471)$$

En pratique, on ne sait en général pas calculer la matrice T exactement. Une approximation possible, pour un potentiel V assez faible (sous des conditions de validité non discutées ici), est d'utiliser

6. Dans la limite de portée nulle $b \rightarrow 0$ (et dans le cas résonnant où l'amplitude de diffusion ne tend pas vers zéro), on pourrait croire qu'il n'y a plus de condition sur r pour que le développement à grand r s'applique. Ceci est vrai à 3D dans le cas de la diffusion résonnante dans l'onde s , mais pas dans le cas de la diffusion résonnante dans l'onde p par exemple, où il faut aussi ajouter la condition $kr \gg 1$. Ceci est dû au fait que $r \mapsto Y_l^m(\theta, \phi) \exp(ikr)/r$ est bien un état propre du laplacien (ici $r > 0$) si $l = 0$, mais pas si $l > 0$.

le développement de Born : à partir du développement (394) de la résolvante en puissances de V , on obtient

$$T = V + VG_0V + VG_0VG_0V + \dots \quad (472)$$

L'approximation de Born consiste à garder le premier terme dans ce développement, soit $T \simeq V$. On trouve alors que l'amplitude de diffusion est simplement proportionnelle à la transformée de Fourier du potentiel au vecteur d'onde $k\mathbf{n} - \mathbf{k}$. Ceci permet une quantification simple de l'hypothèse de courte portée de $V(\mathbf{r})$, qui signifie en pratique que les intégrales sur \mathbf{r}' considérées ici convergent. Dans l'approximation de Born, on voit en effet qu'il suffit que le potentiel décroisse à l'infini plus vite que $1/r^3$ en dimension trois, pour que l'intégrale définissant la transformée de Fourier de $V(\mathbf{r})$ converge absolument. Ceci n'est en fait pas nécessaire pour l'établissement de la théorie générale de la diffusion (dans le cas invariant par rotation, elle s'applique à des potentiels décroissant plus vite que le potentiel coulombien) mais ceci a l'avantage par exemple d'assurer l'existence de la longueur de diffusion introduite dans la section 4.5.2.

Notons pour terminer qu'on est conduit parfois à effectuer les calculs en représentation impulsion plutôt que position. L'opérateur énergie cinétique devient diagonal, et l'action du potentiel dans l'équation de Schrödinger devient un produit de convolution. On peut se demander alors quel est l'équivalent sur $\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \equiv \langle \mathbf{q} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle$ des conditions aux limites (448). La réponse est obtenue simplement en considérant la solution (458) en représentation impulsion :

$$\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k}) + \frac{1}{E + i\eta - \hbar^2 q^2 / 2\mu} \langle \mathbf{q} | T(E + i\eta) | \mathbf{k} \rangle. \quad (473)$$

La distribution δ de Dirac est due bien entendu à l'onde plane incidente. Comme l'élément de matrice de T est *a priori* une fonction régulière de \mathbf{q} , et non pas une distribution, l'ansatz obéissant aux conditions aux limites est donc

$$\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k}) + \frac{1}{E + i\eta - \hbar^2 q^2 / 2\mu} F(\mathbf{q}) \quad (474)$$

où $F(\mathbf{q})$ est une fonction régulière de \mathbf{q} à déterminer par résolution (par exemple numérique) de l'équation de Schrödinger écrite dans l'espace de Fourier.

4.5.2 Limite de basse énergie

Lorsqu'on se restreint aux collisions à basse énergie, en particulier à un vecteur d'onde $k \ll 1/b$, où b est la portée du potentiel, il suffit souvent de connaître le comportement de l'amplitude de diffusion dans cette limite. En dimension trois, on définit ainsi la longueur de diffusion a du potentiel :

$$\lim_{k \rightarrow 0} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) = -a, \quad (475)$$

qui est un paramètre essentiel de la théorie de Bogolioubov du gaz de bosons, voir la section 3.3. Comme le montre l'expression (471) de $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})$, la limite (475) ne dépend pas de la direction \mathbf{n} , ceci même si le potentiel V n'est pas invariant par rotation (pourvu qu'il soit à courte portée).

En pratique, pour calculer la longueur de diffusion, il vaut mieux se placer directement à énergie nulle, plutôt que calculer $f_{\mathbf{k}}$ à tout k et faire tendre k vers zéro. Il suffit ainsi de résoudre l'équation de Schrödinger à énergie nulle,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r}) = 0. \quad (476)$$

On doit trouver alors que la solution à grande distance (en dehors du potentiel) se comporte en

$$\psi_0(\mathbf{r}) = 1 - \frac{a}{r} + O(1/r^2) \quad (477)$$

ce qui donne la valeur de a . Ce comportement se retrouve d'ailleurs très facilement par le raisonnement direct à énergie nulle. En dehors du potentiel (ce qui a un sens exact si V est à support compact), on a en effet $\Delta\psi_0 = 0$. En décomposant ψ_0 sur les harmoniques sphériques de moment cinétique l ,

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \sum_{l,m} f_{l,m}(r) Y_l^m(\mathbf{n}), \quad (478)$$

on voit que c'est la voie $l = 0$ qui domine à grande distance, si l'on exclut les solutions divergentes.⁷ Il reste donc à résoudre $\Delta f = 0$ où $f(r)$ est invariante par rotation :

$$0 = \Delta f = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} [r f(r)] \quad (479)$$

ce qui conduit immédiatement à

$$f(r) = \frac{\alpha + \beta r}{r} \quad (480)$$

où α et β sont deux constantes. À un facteur de normalisation près, on retrouve la forme (477). Forme d'ailleurs qui permet d'expliquer le choix du signe moins dans la définition (475) de a : dans le cas particulier de la diffusion par un potentiel de sphère dure de rayon $a > 0$, on voit que la longueur de diffusion vaut justement a (puisque la fonction d'onde s'annule alors bien si $r = a$).⁸

L'intérêt de ce raisonnement est qu'il se généralise facilement en dimensionnalité réduite, au contraire de (475).

En dimension deux, on résout $\Delta f = 0$ pour f invariante par rotation :

$$0 = \Delta f = f''(r) + \frac{1}{r} f'(r). \quad (481)$$

7. Dans la voie de moment cinétique l , les solutions sont en r^l et $1/r^{l+1}$ en dehors du potentiel.

8. Dans le cas d'un potentiel V invariant par rotation, borné, positif et à support compact ($V(r) = 0$ si $r \geq b$, $+\infty > V(r) \geq 0$ pour tout $r \leq b$), notre solution à énergie nulle $\psi_0(r) = 1 - a/r$ est exacte pour $r \geq b$. Comme V n'a pas d'état lié, ψ_0 ne doit pas avoir de nœud, on peut choisir ψ_0 positive partout (ceci résulte d'un raisonnement variationnel classique). Ceci démontre donc que $a \leq b$. Alors la fonction $r \mapsto r\psi_0(r)$, nulle en $r = 0$, est convexe partout (d'après l'équation de Schrödinger) donc est partout au-dessus de sa tangente en $r = b$. L'écriture de cette condition en $r = 0$ donne $a \geq 0$. La seule façon d'avoir $|a| \gg b$ avec un potentiel $V(r)$ à support compact de rayon b est d'introduire des parties négatives dans le potentiel. On parle alors de diffusion résonnante à énergie nulle, car la section efficace de diffusion à $E = 0$ est beaucoup plus grande que la valeur géométrique attendue $\approx 4\pi b^2$.

Comme $f''(r)/f'(r)$ est la dérivée logarithmique de $f'(r)$, on trouve que $f'(r) = \alpha/r$ donc que $f(r) = \alpha \ln(r) + \beta$, ce que l'on peut récrire

$$f(r) = \alpha \ln(r/a_{2D}) \quad (482)$$

où a_{2D} est la longueur de diffusion en dimension deux, toujours positive. À nouveau, a_{2D} est bien le rayon du potentiel dans le cas particulier de la diffusion par un disque dur, puisque (482) s'annule en $r = a_{2D}$.

En dimension un, la solution de $f'' = 0$ avec f paire donne

$$f(x) = \alpha + \beta|x| = \alpha[1 - |x|/a_{1D}] \quad (483)$$

ce qui définit là aussi une longueur de diffusion a_{1D} . Notons cependant que, dans cette dimensionnalité, la solution impaire en dehors du potentiel (proportionnelle à x) n'est *a priori* pas négligeable à grand $|x|$ par rapport à la solution paire, au contraire des ondes $l > 0$ en dimension trois. Il faut donc en général introduire une deuxième longueur de diffusion à 1D, sauf si l'on se limite à des états stationnaires de diffusion pairs dans un potentiel invariant par parité.

4.5.3 États liés et pôles de l'amplitude de diffusion

L'onde peut admettre des états liés dans le potentiel, qui sont des états propres de l'hamiltonien avec une fonction d'onde de carré sommable. Le problème semble être de nature très différente de celui des états stationnaires de diffusion, en particulier parce que l'énergie des états discrets n'est *a priori* pas connue.

Cependant, l'on peut trouver l'énergie d'états liés simplement en cherchant des pôles dans l'amplitude de diffusion, après avoir étendu la définition de $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})$ aux énergies négatives par la substitution

$$k \rightarrow iq, \quad q > 0. \quad (484)$$

L'énergie $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ devient $-\hbar^2 q^2 / 2\mu < 0$. Mais pourquoi faut-il imposer $q > 0$ (plutôt que $q < 0$) pour effectuer ce prolongement analytique? Pour la raison ayant conduit à (464), que l'onde sortante $\exp(ikr)/r$ ne doit pas exploser mais doit donner naissance à la queue exponentiellement décroissante $\exp(-qr)/r$ de l'état lié à grand r .

Si $f_{\mathbf{k}}$ ainsi étendue diverge pour une certaine valeur $q_0 > 0$ de q , on peut s'attendre à l'existence d'un état lié d'énergie $-\hbar^2 q_0^2 / 2\mu$. L'idée intuitive est que l'amplitude de diffusion s'exprime en fonction de la matrice T , qui dépend de la résolvante $G(E + i\eta)$. Le prolongement aux énergies négatives permet de rencontrer les pôles de la résolvante sur le demi-axe réel négatif, dont les positions sont les énergies du spectre discret.

4.5.4 Matrice S , théorème optique et relation de fermeture

Un point de vue différent sur le problème de diffusion est de chercher à définir l'amplitude de transition entre une onde plane initiale de vecteur d'onde \mathbf{k} préparée très loin dans le passé (à l'ins-

tant t_i) et une onde plane finale de vecteur d'onde \mathbf{k}' détectée par une mesure effectuée très loin dans le futur (à l'instant t_f), ce langage ayant en fait vraiment un sens aux temps t_i, t_f finis pour des paquets d'ondes.

On est donc conduit à considérer

$$\lim_{t_i \rightarrow -\infty, t_f \rightarrow +\infty} \langle \mathbf{k}' | e^{iH_0 t_f / \hbar} U(t_f \leftarrow t_i) e^{-iH_0 t_i / \hbar} | \mathbf{k} \rangle \equiv \langle \mathbf{k}' | S | \mathbf{k} \rangle \quad (485)$$

où S est l'opérateur de diffusion ou matrice S , $U(t_f \leftarrow t_i)$ est l'opérateur d'évolution de l'instant t_i à l'instant t_f pour l'hamiltonien complet H , et les opérateurs d'évolution pour H_0 sont ajoutés de part et d'autre de U pour supprimer l'oscillation temporelle indéfinie de l'amplitude de transition aux énergies E_k et $E_{k'}$ de l'onde asymptotiquement libre.

Par un calcul que nous admettrons, on aboutit à l'expression importante suivante de la matrice S en termes de la matrice T :

$$\langle \mathbf{k}' | S | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle - 2i\pi \langle \mathbf{k}' | T(E_k + i\eta) | \mathbf{k} \rangle \delta(E_k - E_{k'}). \quad (486)$$

On remarquera en particulier le delta de conservation de l'énergie.

Par construction, la matrice S est unitaire. Ceci permet d'obtenir des contraintes sur la matrice T , donc *in fine* sur l'amplitude de diffusion. On obtient en particulier la relation suivante, appelée théorème optique :

$$k \int \frac{d\Omega}{4\pi} |f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})|^2 = \text{Im} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}/k), \quad (487)$$

qui relie donc la partie imaginaire de l'amplitude de diffusion vers l'avant à la section efficace totale de diffusion (on intègre (450) sur 4π stéradians). Intuitivement, ceci fait penser au fait que l'atténuation d'un faisceau lumineux cohérent par propagation dans un milieu est décrite par la partie imaginaire de l'indice de l'onde dans le milieu; le nombre des photons « perdus », c'est-à-dire qui ont quitté le mode initial du faisceau par diffusion sur les côtés, doit pouvoir se déduire aussi bien de la partie imaginaire de l'indice que de la section efficace totale de diffusion, ce qui laisse augurer d'une relation du type (487).

Il est possible de donner une démonstration élémentaire du théorème optique confirmant cette intuition physique. Partons de l'équation de continuité sur la densité de probabilité $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$:

$$\partial_t \rho + \text{div} \mathbf{j} = 0 \quad (488)$$

pour une solution quelconque de l'équation de Schrödinger, \mathbf{j} étant le courant de probabilité

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2i\mu} (\psi^* \mathbf{grad} \psi - \text{c.c.}). \quad (489)$$

Dans le cas d'un état stationnaire de diffusion, l'équation de continuité se réduit à $\text{div} \mathbf{j} = 0$. On en déduit, par la formule d'Ostrogradski, que le flux du courant à travers la sphère S de centre O de rayon R est nul :

$$\phi(\mathbf{j}) = R^2 \int d\Omega \mathbf{n} \cdot \mathbf{j}(R\mathbf{n}) = 0. \quad (490)$$

Il reste à traduire cette condition pour $R \rightarrow +\infty$ en utilisant la forme asymptotique (448). La fonction d'onde étant la somme de l'onde incidente et de l'onde diffusée, le courant se décompose en

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{inc}} + \mathbf{j}_{\text{diff}} + \mathbf{j}_{\text{interf}}, \quad (491)$$

somme du courant de l'onde incidente, du courant de l'onde diffusée et d'un courant provenant de l'interférence entre l'onde incidente et l'onde diffusée. On constate facilement que $\phi(\mathbf{j}_{\text{inc}}) = 0$ et que

$$\phi(\mathbf{j}_{\text{diff}}) = \frac{\hbar k}{\mu} \int d\Omega |f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})|^2. \quad (492)$$

Le calcul du flux de $\mathbf{j}_{\text{interf}}$ à la limite des grands R est un peu plus délicat, et nécessite le lemme suivant :

$$\int_{-1}^1 du g(u) e^{-ikRu} = \frac{1}{-ikR} \left[g(1) e^{-ikR} - g(-1) e^{ikR} \right] + O[(kR)^{-2}], \quad (493)$$

que l'on peut démontrer par intégration par parties pour une fonction assez régulière $g(u)$ de u (en dérivant $g(u)$ puis $g'(u)$ dans l'intégration par parties). On a ici

$$g(\cos\theta) = \frac{\hbar k R}{2\mu} (1 + \cos\theta) e^{ikR} \int_0^{2\pi} d\varphi f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}), \quad (494)$$

où l'on est passé en coordonnées sphériques d'axe la direction de l'onde incidente \mathbf{k}/k , θ et φ étant les angles polaire et azimutal. On voit donc que le terme $g(1)$ fait intervenir l'amplitude de diffusion vers l'avant $\theta = 0$, soit $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$, alors que le terme $g(-1)$ fait intervenir le terme de diffusion vers l'arrière $\theta = \pi$, soit $\mathbf{n} = -\mathbf{k}/k$. Ici $g(-1) = 0$, si bien que seule la diffusion vers l'avant contribue :

$$\phi(\mathbf{j}_{\text{interf}}) = -\frac{4\pi\hbar}{\mu} \text{Im} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}/k). \quad (495)$$

En d'autres termes, l'interférence vers l'avant entre l'onde incidente et l'onde diffusée entraîne une réduction du courant de probabilité dans la direction de l'onde plane incidente, exactement compensée par une augmentation du courant de probabilité dans l'ensemble des autres directions.

Pour terminer, donnons la relation de fermeture satisfaite par les états stationnaires de diffusion et les états liés :

$$\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle \langle \psi_{\mathbf{k}}| = \hat{1} - \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i|. \quad (496)$$

Ceci impose la relation très simple

$$\langle \psi_{\mathbf{k}} | \psi_{\mathbf{k}'} \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (497)$$

Cette relation est vraie clairement en l'absence de potentiel, les états de diffusion étant alors simplement les ondes planes. Intuitivement, on peut se convaincre qu'elle va rester vraie par un argument de branchement adiabatique (très lent) de V , qui va transformer continûment $|\mathbf{k}\rangle$ en $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$, et de manière unitaire puisqu'il s'agit d'une évolution hamiltonienne. De façon plus rigoureuse, on peut la

démontrer en utilisant l'unitarité de la matrice S . Par contre, la démonstration de la relation de fermeture, qui suppose une propriété de complétude, relève de la physique mathématique.

Notons pour terminer que le théorème optique prend une forme très simple pour une diffusion ayant lieu seulement dans l'onde l . Par exemple, dans l'onde s , $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{n})$ est une fonction f_k du module de k seulement. L'équation (487) se réduit alors à $\text{Im } f_k = k|f_k|^2$, c'est-à-dire à $k = \text{Im}(f_k/|f_k|^2) = \text{Im}(1/f_k^*)$, ce qui impose la forme suivante

$$f_k = -\frac{1}{u(k) + ik} \quad (498)$$

où $u(k)$ est une fonction à ce stade quelconque mais réelle. Pour V à suffisamment courte portée, c'est-à-dire décroissant plus vite que $1/r^5$ à l'infini [9], on peut effectuer le développement à faible k :

$$u(k) = \frac{1}{a} - \frac{1}{2}k^2 r_e + o(k^2) \quad (499)$$

où a est la longueur de diffusion et r_e la portée effective du potentiel (pas nécessairement positive). Ce développement conduit à la formule approchée dite approximation de portée nulle :

$$f_k \simeq -\frac{1}{a^{-1} + ik} \quad (500)$$

dont l'utilisation requiert $k^2|r_e| \ll |a^{-1} + ik|$; elle est très commode lorsqu'on a physiquement $k|r_e| \ll 1$ mais $k|a| \gg 1$, cas réalisé expérimentalement avec les atomes froids au voisinage d'une résonance de Feshbach magnétique où a diverge alors que r_e reste fini. On notera que l'amplitude de diffusion (500) satisfait bien au théorème optique pour tout k . Ceci résulte du fait qu'elle est l'amplitude de diffusion exacte d'un hamiltonien modèle auto-adjoint de portée nulle, celui dit des conditions de contact de Wigner-Bethe-Peierls, équivalent au pseudo-potentiel de Fermi de la section 3.3.9.

On trouvera une analyse de la diffusion des ondes plus approfondie que la présente introduction dans le livre de Roger Newton indiqué dans la bibliographie.

5 L'équation pilote

On considère ici un petit système S couplé à un gros réservoir R , gros impliquant en particulier que le spectre de l'hamiltonien du réservoir est un continuum et que l'état du réservoir (initialement stationnaire) sera très peu perturbé par le petit système. On souhaite décrire l'évolution du petit système par une équation fermée sur son opérateur densité, locale en temps, traditionnellement appelée équation pilote, ce qui n'est en général possible que de façon approchée. Cette description est plus globale que celle qu'on obtient avec la résolvante par la méthode des PGP de la section 4.4, en ce qui concerne l'évolution de S , car elle inclut les transferts de population ou de cohérence entre les états de S , pas seulement le départ de la probabilité de présence du sous-espace sur lequel P projette.

Dans un premier temps, on obtient une équation pilote dans l'approximation de Born-Markov. Dans un second temps, on suppose que cette équation est de la forme de Lindblad et on la reformule en termes d'une évolution stochastique de vecteurs d'état de S .

5.1 Obtention dans l'approximation de Born-Markov

L'évolution du système complet (petit système S plus réservoir R) est décrite par l'hamiltonien

$$H = H_S + H_R + V, \quad (501)$$

où H_S est l'hamiltonien du petit système, H_R celui du réservoir et V le couplage, que l'on prendra pour simplifier sous la forme factorisée en un opérateur de S (appelé S) et un opérateur de R (appelé R) :

$$V = S \otimes R. \quad (502)$$

En pratique, le couplage V est une somme de termes de ce type, comme par exemple le couplage dipolaire électrique $-\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r})$ entre un atome (système S) et le champ quantique dans l'espace libre (système R), qui est une somme de trois termes comme (502).

Le point de départ est l'équation de Liouville quantique sur l'opérateur densité du système total :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [H, \rho]. \quad (503)$$

Il sera important dans la suite de pouvoir distinguer l'évolution de S due à son hamiltonien propre de l'évolution de S due au couplage au réservoir. On passe donc en point de vue interaction, dans lequel un opérateur $X(t)$ en point de vue de Schrödinger devient

$$\tilde{X}(t) = e^{i(H_S + H_R)t/\hbar} X(t) e^{-i(H_S + H_R)t/\hbar}, \quad (504)$$

en supposant ici que $H_S + H_R$ est indépendant du temps. L'équation de Liouville devient :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) = [\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(t)]. \quad (505)$$

On intègre formellement cette équation :

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' [\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t')], \quad (506)$$

puis on insère cette expression dans le second membre de (505), et l'on prend la trace sur le réservoir pour obtenir :

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}_S = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}_R \{[\tilde{V}(t), \rho(0)]\} - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \text{Tr}_R \{[\tilde{V}(t), [\tilde{V}(t-t'), \tilde{\rho}(t-t')]]\} \quad (507)$$

où l'on a effectué le changement de variables $t' = t - \tau$ et utilisé le fait que $\tilde{\rho}_S = \text{Tr}_R \tilde{\rho}$.

On effectue d'abord des hypothèses simplificatrices. On suppose que l'opérateur densité initial du système total est factorisé :

$$\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_R(0). \quad (508)$$

On suppose que l'opérateur densité initial du réservoir est stationnaire pour l'évolution non perturbée :

$$[\rho_R(0), H_R] = 0. \quad (509)$$

$\rho_R(0)$ est donc un mélange statistique d'états propres de H_R ,

$$\rho_R(0) = \int dk \Pi_k |k\rangle \langle k|. \quad (510)$$

Pour terminer, on suppose (comme c'est le cas dans l'interaction dipolaire électrique entre un atome et le rayonnement) que l'opérateur R est purement non diagonal dans la base propre de H_R , si bien que la première trace dans le second membre de (507) est nulle.⁹

Pour obtenir une équation fermée sur ρ_S à partir de (507), le plus simple est de faire une approximation de décorrélation :

$$\tilde{\rho}(t) \simeq \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0). \quad (511)$$

Ceci suppose que le réservoir est effectivement peu perturbé par le couplage à S , et que les corrélations entre le petit système et le réservoir sont faibles. Notons que ces corrélations ne sont pas totalement négligées, car la forme décorrélée (511) est insérée à l'intérieur d'un double commutateur : les corrélations sont traitées perturbativement, aussi parle-t-on d'approximation de Born. Sous cette approximation, en développant le double commutateur dans (507), on obtient une équation pilote non locale en temps :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_S = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau & [g(\tau) \tilde{S}(t) \tilde{S}(t-\tau) \tilde{\rho}_S(t-\tau) + g(-\tau) \tilde{\rho}_S(t-\tau) \tilde{S}(t-\tau) \tilde{S}(t) \\ & - g(\tau) \tilde{S}(t-\tau) \tilde{\rho}_S(t-\tau) \tilde{S}(t) - g(-\tau) \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t-\tau) \tilde{S}(t-\tau)]. \end{aligned} \quad (512)$$

Notons l'émergence de deux types de termes, ceux dans lesquels le couplage au réservoir donne deux facteurs S du même côté de l'opérateur densité, et ceux dans lesquels $\tilde{\rho}_S$ est pris en tenaille. Ils donnent naissance à des effets physiques différents, comme nous le verrons.

Il est temps de dire que l'on a introduit dans l'équation précédente la fonction de corrélation temporelle de l'opérateur R dans l'état non perturbé du réservoir, qui dépend seulement de la différence des temps puisque $\rho_R(0)$ est stationnaire pour l'évolution d'hamiltonien H_R :

$$g(\tau) = \text{Tr}_R [\tilde{R}(t) \tilde{R}(t-\tau) \rho_R(0)] = \text{Tr}_R [\tilde{R}(\tau) R \rho_R(0)] \quad (513)$$

$$= \int dk \int dl \Pi_k |\langle k|R|l\rangle|^2 e^{i\omega_{kl}\tau} \quad (514)$$

avec la pulsation de Bohr $\omega_{kl} = (\epsilon_k - \epsilon_l)/\hbar$ entre deux états propres k et l de H_R . Notons qu'en général $g(\tau)$ n'est pas une fonction paire du temps, puisque les opérateurs \tilde{R} pris à des temps différents ne commutent pas. On a simplement

$$g(-\tau) = g^*(\tau). \quad (515)$$

9. Si cette condition n'était pas satisfaite, on aurait $\langle R \rangle \neq 0$. On pourrait séparer l'opérateur R en somme de sa valeur moyenne $\langle R \rangle$ et d'un opérateur de moyenne nulle, ce qui ferait apparaître un terme de « champ moyen » $V_{\text{cm}} = S \langle R \rangle$ que l'on inclurait dans H_S avant d'appliquer la méthode de calcul exposée.

Comme H_R a un spectre continu, on s'attend à ce que la fonction de corrélation $g(\tau)$ tende vers zéro à l'infini, avec une largeur caractéristique que l'on appelle τ_c , un temps de corrélation du réservoir. On se place alors dans le cas où $\tilde{\rho}_S$ évolue très peu à l'échelle de τ_c , c'est-à-dire que

$$\Gamma\tau_c \ll 1 \quad \text{et} \quad |\Delta|\tau_c \ll 1 \quad (516)$$

où Γ est un taux d'amortissement typique et Δ une pulsation d'oscillation typique de $\tilde{\rho}_S$. On effectue donc dans (512) l'approximation $\tilde{\rho}_S(t - \tau) \simeq \tilde{\rho}_S(t)$ et on étend l'intégrale sur τ jusqu'à $+\infty$, ce qui ne pose pas de problème si l'on se place à $t \gg \tau_c$. Cette approximation est dite de Markov.

En quittant le point de vue interaction pour ρ_S , on obtient finalement dans l'approximation de Born-Markov l'équation pilote

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_S &= \frac{1}{i\hbar} \left[H_{\text{eff}}\rho_S - \rho_S H_{\text{eff}}^\dagger \right] \\ &+ \int_0^{+\infty} \frac{d\tau}{\hbar^2} \left[g(\tau)\tilde{S}(-\tau)\rho_S(t)\tilde{S}(0) + \text{h.c.} \right], \end{aligned} \quad (517)$$

où l'on a introduit l'hamiltonien effectif non hermitien

$$H_{\text{eff}} = H_S + \frac{1}{i\hbar} \int_0^{+\infty} d\tau g(\tau)\tilde{S}(0)\tilde{S}(-\tau). \quad (518)$$

La première ligne, qui est une évolution hamiltonienne, correspond aux termes du double commutateur en V dans (507) dans lesquels les facteurs V sont du même côté de ρ_S ; comme nous le verrons dans la section 5.2, la partie antihermitienne de H_{eff} dans la base propre de H_S a ses éléments diagonaux négatifs, ceci correspond physiquement à des termes de *départ* de population. La seconde ligne de (517) n'est pas une évolution hamiltonienne, puisque ρ_S est pris en tenaille entre deux opérateurs; elle contient des termes d'*arrivée*, l'augmentation de population correspondante compensant la perte de population due à H_{eff} de façon que la trace de ρ_S reste constante.

5.2 Étude dans la base propre de H_S

Introduisons la base propre de H_S , que l'on suppose ici discrète pour simplifier :

$$H_S|\alpha\rangle = \epsilon_\alpha|\alpha\rangle. \quad (519)$$

L'écriture de l'équation pilote dans cette base apporte un éclairage physique intéressant, comme nous allons le voir.

5.2.1 Comparaison de H_{eff} avec le formalisme $PG(z)P$

Pour comparer H_{eff} avec l'hamiltonien effectif (399) introduit dans la section sur la résolvente, calculons l'élément de matrice diagonal de H_{eff} dans l'état $|\alpha\rangle$. Le résultat est *a priori* un nombre

complexe, on décompose donc la contribution du second terme de (518) en une partie réelle et une partie imaginaire :

$$\langle \alpha | H_{\text{eff}} | \alpha \rangle = \epsilon_\alpha + \hbar \Delta_\alpha - i \hbar \Gamma_\alpha / 2. \quad (520)$$

Δ_α est un déplacement du niveau d'énergie α du système S dû au couplage avec le réservoir (effet réactif). La partie en Γ_α , si elle est non nulle, traduit la durée de vie finie acquise par le niveau α au contact du réservoir (effet dissipatif). Après un calcul explicite, on trouve en effet que

$$\langle \alpha | H_{\text{eff}} | \alpha \rangle = \epsilon_\alpha + \int dk \Pi_k \langle \alpha, k | V \frac{1}{\epsilon_\alpha + \epsilon_k + i\eta - (H_R + H_S)} V | \alpha, k \rangle, \quad (521)$$

où $\eta \rightarrow 0^+$, si bien que $\Gamma_\alpha \geq 0$ d'après (367). À état fixé $|k\rangle$ du réservoir, on reconnaît l'hamiltonien effectif obtenu par le formalisme $PG(z)P$, où P projette sur $|\alpha, k\rangle$, à condition que l'on fasse la double approximation du pôle et d'un calcul perturbatif à l'ordre deux en V , ce qui nous ramène à la règle d'or de Fermi, voir la section 4.4.4. Comme le réservoir est *a priori* dans un mélange statistique (510), il faut de plus moyenner cet hamiltonien effectif sur la distribution Π_k pour obtenir $\langle \alpha | H_{\text{eff}} | \alpha \rangle$.

5.2.2 Équation pilote dans l'approximation séculaire

L'écriture de l'équation pilote dans la base propre $\{|\alpha\rangle\}$ de H_S ne donne en général pas un résultat très simple, les *populations* $\Pi_\alpha = \langle \alpha | \rho_S | \alpha \rangle$ étant couplées aux *cohérences* $\langle \alpha | \rho_S | \beta \rangle$, $\alpha \neq \beta$. Il y a cependant un régime où l'on peut tenter une approximation simplificatrice : c'est le régime séculaire, dans lequel les pulsations de Bohr

$$\omega_{\alpha\beta} \equiv \frac{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta}{\hbar}, \quad (522)$$

qui donnent la fréquence d'évolution des cohérences en l'absence de couplage au réservoir, sont beaucoup plus grandes que les taux d'évolution de $\tilde{\rho}_S(t)$ induits par ce couplage. Ceci implique en particulier que $|\langle \alpha | H_{\text{eff}} | \beta \rangle| \ll \hbar |\omega_{\alpha\beta}|$. Dans l'équation donnant $d\Pi_\alpha/dt$, les cohérences donnent des contributions rapidement oscillantes, qui se moyennent temporellement presque à zéro ; les négliger revient à effectuer l'approximation séculaire, bien connue en dynamique hamiltonienne classique (des corps célestes en particulier, d'où le nom). On trouve alors des équations de taux sur les populations de ρ_S :

$$\frac{d}{dt} \Pi_\alpha = -\Gamma_\alpha \Pi_\alpha + \sum_\beta \Gamma_{\beta \rightarrow \alpha} \Pi_\beta, \quad (523)$$

où la somme sur β inclut le terme $\beta = \alpha$, point sur lequel nous reviendrons. La conservation de la probabilité totale donne immédiatement :

$$\Gamma_\alpha = \sum_\beta \Gamma_{\alpha \rightarrow \beta}. \quad (524)$$

L'expression du taux de transition du niveau β vers le niveau α est très parlante :

$$\Gamma_{\beta \rightarrow \alpha} = |\langle \beta | S | \alpha \rangle|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\tau}{\hbar^2} e^{i\omega_{\beta\alpha}\tau} g(\tau) \quad (525)$$

où l'on a utilisé la propriété (515). Dans l'approximation de Born considérée ici, la transition directe du niveau β vers le niveau α n'est possible que si l'amplitude de transition entre ces niveaux due à $V = SR$ est non nulle. L'intégrale sur le temps est une transformée de Fourier de la fonction de corrélation du réservoir à la pulsation de Bohr de la transition, ce qui peut être compris simplement : selon une image classique en résonance magnétique nucléaire de l'effet d'un champ bruité sur un spin, le taux de transition $\beta \rightarrow \alpha$ est proportionnel à la densité spectrale de bruit du « champ » $R(t)$ du réservoir à la pulsation de Bohr de la transition. En utilisant l'expression (514) de $g(\tau)$, on constate que l'intégrale sur τ fait apparaître un Dirac de conservation de l'énergie du système total $S + R$, de la forme $\delta(\omega_{kl} + \omega_{\beta\alpha}) = \delta(\epsilon_k + \epsilon_\beta - \epsilon_l - \epsilon_\alpha)$, l'état $|k\rangle$ du réservoir étant bien l'état initial puisque la moyenne statistique avec le poids Π_k dans (514) est prise sur l'état initial.

Le taux de transition de « soi-même vers soi-même » $\Gamma_{\alpha \rightarrow \alpha}$ apparaît deux fois dans les équations de taux (523), d'une façon qui lui donne une contribution totale nulle. Il est donc plus physique d'y remplacer Γ_α par le véritable taux de dépopulation du niveau α :

$$\Gamma_\alpha^{\text{dépop}} \equiv \sum_{\beta \neq \alpha} \Gamma_{\alpha \rightarrow \beta} \quad (526)$$

et de restreindre la somme sur β à $\beta \neq \alpha$ dans le terme d'alimentation de Π_α . Donnons un exemple où la différence entre Γ_α et $\Gamma_\alpha^{\text{dépop}}$ est considérable, celui des collisions déphasantes entre un atome à deux niveaux a et b (notre système S) et un gaz d'une autre espèce (notre réservoir R) : les collisions déphasantes ne changent pas l'état atomique interne, donc sont de la forme $a+\text{autre} \rightarrow a+\text{autre}$, mais peuvent changer la phase des états. On a donc $\langle \alpha | S | \alpha \rangle \neq 0$ mais $\langle \alpha | S | \beta \rangle = 0$ si $\beta \neq \alpha$, si bien que $\Gamma_\alpha \neq 0$ alors que $\Gamma_\alpha^{\text{dépop}} = 0$.

On peut aussi appliquer l'approximation séculaire à la cohérence $\langle \alpha | \rho_S | \beta \rangle$ pourvu qu'elle soit isolée dans l'espace des fréquences, c'est-à-dire que $|\omega_{\alpha\beta} - \omega_{\gamma\delta}|$ est beaucoup plus grand que les taux d'évolution de $\tilde{\rho}_S(t)$ pour toute paire de niveaux γ, δ autre que la paire considérée α, β . L'équation pilote donne alors

$$\frac{d}{dt} \langle \alpha | \tilde{\rho}_S | \beta \rangle = [-i(\Delta_\alpha - \Delta_\beta) - \Gamma_{\alpha\beta}] \langle \alpha | \tilde{\rho}_S | \beta \rangle \quad (527)$$

où les déplacements d'énergie dus au réservoir sont donnés par (520) et où le taux de décroissance de la cohérence est la somme de deux contributions :

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \Gamma_{\alpha\beta}^{\text{dépop}} + \Gamma_{\alpha\beta}^{\text{déphas}}. \quad (528)$$

La première contribution est celle due à la dépopulation des niveaux α et β à laquelle la cohérence ne survit évidemment pas :

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{\text{dépop}} = \frac{1}{2} (\Gamma_\alpha^{\text{dépop}} + \Gamma_\beta^{\text{dépop}}). \quad (529)$$

La deuxième est un taux supplémentaire prenant en compte le fait qu'une cohérence peut décroître à cause d'un déphasage aléatoire induit par le réservoir sur les niveaux de S même en l'absence de

transfert de population :

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{\text{déphas}} = \frac{1}{2} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\tau}{\hbar^2} g(\tau) \right) (\langle \alpha | S | \alpha \rangle - \langle \beta | S | \beta \rangle)^2. \quad (530)$$

Dans le cas des collisions déphasantes, $\Gamma_{\alpha\beta}^{\text{dépop}} = 0$, alors que $\Gamma_{\alpha\beta}^{\text{déphas}} > 0$ si le déphasage aléatoire subi n'est pas le même pour les deux niveaux (ce qui implique donc $\langle \alpha | S | \alpha \rangle \neq \langle \beta | S | \beta \rangle$).

5.3 La forme de Lindblad

Nous adoptons ici un point de vue différent, indépendant de tout modèle physique particulier. Nous supposons qu'il existe une équation sur ρ_S locale en temps, obtenue à la suite d'une procédure approchée qui n'importe pas,

$$\frac{d}{dt} \rho_S = \mathcal{L}[\rho_S] \quad (531)$$

où \mathcal{L} est un opérateur agissant linéairement sur l'espace de Liouville, c'est-à-dire sur l'espace des opérateurs du système S . Nous utilisons ensuite un résultat de physique mathématique établi par Lindblad [10], qui impose une forme nécessaire au liouvillien \mathcal{L} pour que les trois propriétés hautement désirables suivantes soient satisfaites, pour un opérateur densité donné à l'instant initial t_0 :

1. la trace de $\rho_S(t)$ reste égale à un à tout temps t ultérieur à t_0
2. $\rho_S(t)$ reste un opérateur hermitien positif à tout temps t ultérieur à t_0
3. on introduit un système fictif T parfaitement inerte si bien que l'opérateur densité de l'ensemble $S + T$ évolue selon l'équation

$$\frac{d}{dt} \rho_{S+T} = (\mathcal{L} \otimes \hat{1}_T) [\rho_{S+T}] \quad (532)$$

où $\hat{1}_T$ est l'opérateur identité sur T . $\rho_{S+T}(t)$ doit rester positif, ce qui est une condition (dite de complète positivité) non triviale pour un état initial intriqué de S et T .

Alors il existe un opérateur hermitien H_0 et un ensemble (peut-être infini) d'opérateurs C_k du système S tels que

$$\frac{d}{dt} \rho_S = \frac{1}{i\hbar} \left[H_{\text{eff}} \rho_S - \rho_S H_{\text{eff}}^\dagger \right] + \sum_k C_k \rho_S C_k^\dagger \quad (533)$$

avec l'hamiltonien effectif

$$H_{\text{eff}} = H_0 - \frac{i\hbar}{2} \sum_k C_k^\dagger C_k, \quad (534)$$

la partie hermitienne H_0 étant quelconque car non contrainte par les hypothèses sur \mathcal{L} , au contraire de la partie antihermitienne. Cette forme du liouvillien s'appelle forme de Lindblad.

Une remarque importante sur la forme de Lindblad est la non-unicité de son écriture. Considérons un mélange unitaire des opérateurs C_k ,

$$\hat{C}_k = \sum_m U_{km} C_m \quad (535)$$

où la matrice carrée U est unitaire, $U^\dagger U = U U^\dagger = \hat{1}_S$. On constate alors que le remplacement des C_k par les \hat{C}_k dans (533) ne change pas la valeur du liouvillien \mathcal{L} ni même celle de H_{eff} . De plus, si l'on ajoute à la liste des C_k un opérateur C_0 proportionnel à l'identité,

$$C_0 = \gamma^{1/2} \hat{1}_S \quad (536)$$

où γ est un taux quelconque, on constate que l'hamiltonien effectif acquiert un terme supplémentaire $-i\hbar\gamma/2$ mais que \mathcal{L} n'est pas changé. On peut s'amuser à combiner les deux transformations, ajout d'un C_0 puis mélange unitaire, toujours sans changer \mathcal{L} .

Un point délicat est que l'équation pilote (517) obtenue dans l'approximation de Born-Markov n'est pas toujours de la forme de Lindblad. Mais elle doit alors en différer par des termes qui sont petits dans la limite (516), et qu'il vaut mieux négliger.

En pratique, on souhaite donc utiliser des équations pilotes de la forme de Lindblad, que l'on peut décrire de façon très condensée en spécifiant seulement les opérateurs H_0 et les C_k , plutôt qu'en explicitant l'équation dans une base. Donnons trois exemples. D'abord, celui d'un mode du champ électromagnétique décroissant dans une cavité avec le taux κ :

$$H_0 = \hbar\omega_0 a^\dagger a \quad (537)$$

$$C = \sqrt{\kappa} a. \quad (538)$$

On voit que l'effet de C sur un vecteur d'état du champ est d'annihiler un photon. Ensuite, l'exemple des équations de Bloch optiques pour un atome à deux niveaux f, e sujet à l'émission spontanée avec un taux Γ et éclairé par un faisceau laser désaccordé en pulsation de $\delta = \omega_L - \omega_{\text{at}}$ de la transition atomique :

$$H_0 = -\hbar\delta |e\rangle\langle e| + \left[\frac{\hbar\Omega}{2} |e\rangle\langle f| + \text{h.c.} \right] \quad (539)$$

$$C = \sqrt{\Gamma} |f\rangle\langle e|. \quad (540)$$

La dépendance en temps de la pulsation de Rabi Ω a été éliminée comme d'habitude en se plaçant dans le référentiel tournant à la pulsation du laser ω_L . L'action de C est de faire passer l'atome de l'état excité à l'état fondamental. Pour terminer, l'exemple d'un atome à deux niveaux a, b subissant avec un taux γ des collisions purement déphasantes dans un gaz tampon, c'est-à-dire des collisions ne changeant pas la population des niveaux :

$$H_0 = \epsilon_a |a\rangle\langle a| + \epsilon_b |b\rangle\langle b| \quad (541)$$

$$C_1 = \sqrt{\gamma} |a\rangle\langle a| \quad (542)$$

$$C_2 = \sqrt{\gamma} |b\rangle\langle b|. \quad (543)$$

L'action de $C_{1,2}$ est de projeter le vecteur d'état atomique sur a ou sur b , ce qui supprime effectivement la cohérence de phase entre les deux états.

5.4 Les fonctions d'onde Monte-Carlo

Nous allons maintenant reformuler l'équation pilote de Lindblad sur $\rho_S(t)$ en termes d'évolution stochastique de « fonctions d'onde » c'est-à-dire de vecteurs d'état $|\phi(t)\rangle$ de S , la moyenne sur toutes les évolutions stochastiques possibles devant redonner exactement la solution de l'équation pilote :

$$\rho_S(t) = \langle |\phi(t)\rangle \langle \phi(t)| \rangle. \quad (544)$$

La motivation est double : la formulation stochastique apporte souvent un éclairage physique intéressant, car elle est plus intuitive que l'équation pilote, mais elle peut être aussi plus efficace pour la résolution du problème, en particulier dans le cas d'une résolution numérique, $|\phi\rangle$ étant un objet plus petit que $\rho_S(t)$.

Cette dualité entre une description déterministe et une description stochastique existe bien entendu en physique classique. Prenons l'exemple du mouvement brownien à une dimension. On peut soit écrire une équation déterministe, l'équation de Fokker-Planck, sur la distribution de probabilité $P(X, t)$ de la position X de la particule à l'instant t , soit écrire une équation différentielle stochastique (à la Langevin) donnant l'évolution de la position $X(t)$ et moyenner sur toutes les trajectoires possibles.

Supposons qu'à l'instant t , le système soit dans le cas pur $\sigma_S(t) = |\phi(t)\rangle \langle \phi(t)|$. Si t vaut t_0 , l'instant initial de l'évolution, on peut se ramener à ce cas par diagonalisation de $\rho_S(t_0)$. Sinon, cette hypothèse résultera naturellement de la méthode Monte-Carlo que nous sommes en train de construire.

À l'instant $t + \delta t$, où δt est arbitrairement petit, on a

$$\sigma_S(t + \delta t) = \sigma_S(t) + \delta t \frac{d\sigma_S}{dt}(t) + O[(\delta t)^2] \quad (545)$$

$$\begin{aligned} &= (1 - i\delta t H_{\text{eff}}/\hbar) |\phi(t)\rangle \langle \phi(t)| (1 + i\delta t H_{\text{eff}}^\dagger/\hbar) \\ &\quad + \sum_k \delta t C_k |\phi(t)\rangle \langle \phi(t)| C_k^\dagger + O[(\delta t)^2] \end{aligned} \quad (546)$$

où l'on a utilisé le fait que σ_S obéit à l'équation pilote de Lindblad (533). On arrive sans peine à récrire le résultat sous la forme d'un mélange statistique de cas purs :

$$\sigma_S(t + \delta t) = \left(1 - \sum_k' \delta \pi_k \right) |\phi_0\rangle \langle \phi_0| + \sum_k' \delta \pi_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k| + O[(\delta t)^2], \quad (547)$$

où $|\phi_0\rangle$ et les $|\phi_k\rangle$ sont normalisés à l'unité, les $\delta \pi_k$ sont positifs, et $1 - \sum_k' \delta \pi_k$, dont l'expression est imposée par la conservation de la trace, est positif dans la limite $\delta t \rightarrow 0$. Le prime dans la somme sur k signifie qu'on se limite aux k pour lesquels $C_k |\phi(t)\rangle$ est non nul. Pour les k correspondants, on a alors défini

$$|\phi_k\rangle = \frac{C_k |\phi(t)\rangle}{\|C_k |\phi(t)\rangle\|} \quad (548)$$

$$\delta \pi_k = \delta t \langle \phi(t) | C_k^\dagger C_k | \phi(t) \rangle. \quad (549)$$

Par ailleurs, on utilise pour $|\phi_0\rangle$ l'expression non perturbative

$$|\phi_0\rangle = \frac{e^{-iH_{\text{eff}}\delta t/\hbar}|\phi(t)\rangle}{\|e^{-iH_{\text{eff}}\delta t/\hbar}|\phi(t)\rangle\|}. \quad (550)$$

L'algorithme des fonctions d'onde Monte-Carlo consiste alors simplement à choisir de façon aléatoire l'un des cas purs dans le mélange statistique (547) :

- avec une probabilité $1 - \sum_k' \delta\pi_k$, on choisit $|\phi(t + \delta t)\rangle = |\phi_0\rangle$. Il s'agit d'une évolution continue et déterministe sous l'effet de l'hamiltonien H_{eff} , suivie d'une renormalisation.
- avec une probabilité $\delta\pi_k$, on choisit $|\phi(t + \delta t)\rangle = |\phi_k\rangle$. Il s'agit d'un *saut quantique* du système dans l'état $|\phi_k\rangle$.

Par construction, à la limite $\delta t \rightarrow 0$, l'algorithme satisfait à l'équation (544), après moyenne donc sur toutes les évolutions stochastiques et états initiaux possibles de $|\phi\rangle$.

Une question naturelle est de chercher à donner un sens physique à l'évolution stochastique que nous venons de construire. À cause de la non-unicité des C_k dans l'écriture de la forme de Lindblad, mentionnée dans la section 5.3, on voit qu'en général, il ne peut pas y avoir de sens physique absolu. Cependant, dans certains cas, si l'on suppose qu'un observateur effectue un certain type de mesures en continu sur l'état du *réservoir* (ce qui par hypothèse ne change pas l'évolution de ρ_S après moyenne sur les résultats de mesure), on peut déterminer quelle écriture des C_k convient pour que l'évolution stochastique reproduise l'évolution du système *conditionnée* aux résultats des mesures. Dans ce cas, l'évolution de $|\phi\rangle$ a une réalité physique et donne même plus d'information que ρ_S , puisque ρ_S est obtenue en prenant la trace sur l'état du réservoir, c'est-à-dire la moyenne sur tous les résultats de mesure possibles de l'observateur. Une discussion plus approfondie est disponible dans les références [11].

En pratique, il existe une façon efficace d'implémenter la méthode Monte-Carlo, s'affranchissant d'une discrétisation temporelle avec un pas δt arbitrairement petit. On introduit pour cela la fonction délai

$$P_{\phi(t_0)}(\tau) = \|e^{-iH_{\text{eff}}\tau/\hbar}|\phi(t_0)\rangle\|^2. \quad (551)$$

On peut montrer que cette fonction est simplement la probabilité pour qu'il n'y ait aucun saut quantique entre t_0 et $t_0 + \tau$, l'état initial de $|\phi\rangle$ à l'instant t_0 étant fixé. L'écriture (551) est donnée dans le cas où H_{eff} est indépendant du temps, mais la généralisation au cas où H_{eff} dépend du temps est immédiate. Notons que $P(\tau)$ est une fonction décroissante de τ , mais qui ne tend pas nécessairement vers zéro. Alors, pour choisir l'instant du premier saut à $t_s = t_0 + \tau_s$, où $\tau_s > 0$, il suffit de tirer un nombre aléatoire ϵ uniformément dans l'intervalle $]0, 1]$ et de résoudre l'équation

$$P(\tau_s) = \epsilon. \quad (552)$$

Cette équation admet au plus une solution car $P(\tau)$ est décroissante. Elle n'en admet aucune si $\epsilon < \lim_{\tau \rightarrow +\infty} P(\tau)$, auquel cas l'évolution reste hamiltonienne sans saut quantique *ad infinitum*. Pour ter-

miner, notons que la distribution de probabilité de τ_s est simplement

$$\pi(\tau) = -\frac{d}{d\tau}P(\tau). \quad (553)$$

5.5 Le théorème de régression quantique

Considérons A et B deux opérateurs de S . On veut déterminer la fonction de corrélation $\langle A(t)B(t') \rangle$ où la moyenne est prise dans l'état de $S + R$, A et B sont définis en point de vue de Heisenberg pour l'hamiltonien complet $H_S + H_R + V$, et $t \geq t'$. On introduit l'opérateur de S noté $\sigma_B(t)$, obéissant pour $t \geq t'$ à la même équation pilote (517) que ρ_S , si ce n'est que σ_B n'est en général pas hermitien et prend la valeur initiale $\sigma_B(t') = B\rho_S(t')$. Alors dans l'approximation de Born-Markov, on obtient le résultat suivant :

$$\langle A(t)B(t') \rangle = \text{Tr}[A\sigma_B(t)]. \quad (554)$$

5.6 Point de vue de Heisenberg stochastique

Il est souvent commode d'adopter le point de vue de Heisenberg pour étudier l'évolution d'un système quantique, en particulier lorsqu'il est composé de champs quantiques (cas d'un gaz décrit en seconde quantification ou cas d'un champ électromagnétique). Comment faire lorsque l'on veut se restreindre à la dynamique du système S après élimination du réservoir? La réponse n'est pas directe, car cette évolution de S est non hamiltonienne. Et l'on ne peut pas, bien entendu, utiliser le point de vue de Heisenberg habituel pour le système complet $S + R$ car ceci fait revenir à la case départ et s'appuyer sur l'hamiltonien complet H plutôt que sur l'évolution approchée induite par l'équation pilote.

Considérons un opérateur quelconque A du système S . En l'absence de couplage au réservoir, l'équation du mouvement en point de vue de Heisenberg restreint au système S est nécessairement $i\hbar dA/dt = [A, H_S]$. En présence du couplage au réservoir, il apparaît bien un hamiltonien effectif, donc on peut être tenté d'écrire $i\hbar dA/dt \stackrel{?}{=} [A, H_{\text{eff}}]$ mais l'on réalise vite que c'est absurde lorsque H_{eff} n'est pas hermitien. Par exemple, les relations de commutation entre deux opérateurs conjugués A et B du système S , $[A, B] = i\hbar$, ne seraient pas conservées au cours du temps.

Pour s'en sortir, il faut, comme dans le cas des fonctions d'onde Monte-Carlo, introduire un élément stochastique, sous la forme de bruits quantiques dB_k en nombre égal aux opérateurs C_k dans la forme de Lindblad. Ces bruits sont des opérateurs du système de moyenne nulle (d'où leur appellation). En formalisme d'Ito, on doit prendre :

$$dA = \frac{1}{i\hbar}[A, H_0]dt + \frac{1}{2} \sum_k \left\{ C_k^\dagger [A, C_k] - [A, C_k^\dagger] C_k \right\} dt + dA_{\text{stoch}} \quad (555)$$

avec le bruit

$$dA_{\text{stoch}} = \sum_k [C_k^\dagger, A] dB_k + dB_k^\dagger [A, C_k]. \quad (556)$$

Dans ces expressions, tous les opérateurs sont considérés en point de vue de Heisenberg à l'instant t , et les bruits quantiques obéissent aux règles suivantes :

- les $dB_k(t)$ et les $dB_k^\dagger(t)$ commutent avec tous les opérateurs du système considérés à des instants t' antérieurs à t ($t' \leq t$).
- on a les règles du calcul d'Ito suivantes (tout monôme quadratique en les bruits devant être remplacé implicitement par sa valeur moyenne non fluctuante) :

$$dB_k(t)dB_m^\dagger(t) = dt\delta_{km} \quad (557)$$

$$dB_k^\dagger(t)dB_m(t) = 0 \quad (558)$$

$$dB_k^\dagger(t)dB_m^\dagger(t) = 0 \quad (559)$$

$$dB_k(t)dB_m(t) = 0. \quad (560)$$

- on voit en particulier que la moyenne de toute expression $XdB_k(t)$ ou $dB_k^\dagger(t)X$ est nulle. Il est instructif de vérifier que cette construction donne bien par exemple

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \text{Tr} \left[A \frac{d\rho_S}{dt} \right] \quad (561)$$

$$\frac{d}{dt}\langle A^2 \rangle = \text{Tr} \left[A^2 \frac{d\rho_S}{dt} \right] \quad (562)$$

où A est en point de vue de Schrödinger dans les membres de droite. L'obtention de l'équation (561) est assez directe, l'obtention de l'équation (562) est plus subtile car fait intervenir les fonctions de corrélation du bruit. On rappelle qu'il faut garder tous les termes jusqu'à l'ordre dt inclus dans une variation, sachant que les bruits sont d'ordre \sqrt{dt} :

$$d(A^2) = (A + dA)^2 - A^2 = AdA + dAA + (dA_{\text{stoch}})^2. \quad (563)$$

On peut aussi retrouver le théorème de régression quantique de la section 5.5 avec ce formalisme. Le lecteur est renvoyé au livre de Crispin Gardiner et Peter Zoller dans la bibliographie, pour plus de détails sur ces équations différentielles stochastiques.

6 Bibliographie

- Jean-Paul Blaizot, Georges Ripka : *Quantum theory of Finite Systems* (The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1986).
- Alexander Fetter, John Dirk Walecka : *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, chapitre 1 (Dover Publications, Mineola, New York, 2003).
- Michael Reed, Barry Simon, *Methods of modern mathematical physics, I. Functional analysis, revised and enlarged edition*, §VII.2, page 227 (Academic Press, London, 1980) (utile pour le théorème de décomposition spectrale d'un opérateur auto-adjoint).

- Roger Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles* (Dover, 2002).
- Claude Cohen-Tannoudji, Jacques Dupont-Roc, Gilbert Grynberg : *Processus d'interaction entre photons et atomes* (InterEditions/Editions du CNRS, Paris, 1988).
- Crispin Gardiner, Peter Zoller : *Quantum Noise* (Springer, Berlin, 2004).

7 Références

- [1] C. Herzog, M. Olshanii, “Trapped Bose gas: The canonical versus grand canonical statistics”, *Phys. Rev. A* **55**, 3254 (1997).
- [2] A.J. Lichtenberg, M.A. Lieberman, *Regular and Stochastic Motion*, §3.3a p.181 (Springer-Verlag, New York, 1983).
- [3] Y. Castin, R. Dum, “Low temperature Bose-Einstein condensates in time dependent traps: beyond the $U(1)$ -symmetry breaking approach”, *Phys. Rev. A* **57**, 3008 (1998); Y. Castin, « Bose-Einstein Condensates in Atomic Gases », p.1-136, dans *Coherent Atomic Matter Waves*, notes de cours de l'école d'été des Houches de 1999, sous la direction de R. Kaiser, C. Westbrook, F. David (EDP Sciences/Springer, Les Ulis/Berlin, 2001).
- [4] C. Mora, Y. Castin, “Extension of Bogoliubov theory to quasicondensates”, *Phys. Rev. A* **67**, 053615 (2003); Y. Castin, “Simple theoretical tools for low dimension Bose gases”, Lecture notes of the 2003 Les Houches Spring School, *Quantum Gases in Low Dimensions*, M. Olshanii, H. Perrin, L. Pricoupenko, Eds., *J. Phys. IV France* **116**, p.89-132 (2004).
- [5] N.D. Mermin, H. Wagner, “Absence of ferromagnetism and antiferromagnetism in one- or two-dimensional Heisenberg models”, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966); P.C. Hohenberg, “Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions”, *Phys. Rev.* **158**, 383 (1967).
- [6] T.D. Lee, C.N. Yang, “Many-Body Problem in Quantum Mechanics and Quantum Statistical Mechanics”, *Phys. Rev.* **105**, 1119 (1957).
- [7] T.D. Lee, Kerson Huang, C.N. Yang, “Eigenvalues and Eigenfunctions of a Bose System of Hard Spheres and Its Low-Temperature Properties”, *Phys. Rev.* **106**, 1135 (1957).
- [8] M.L. Goldberger, K.M. Watson, *Collision Theory*, chapitre 8 (Wiley, New York, 1964).
- [9] N.N. Khuri, A. Martin, J.-M. Richard, Tai Tsun Wu, “Low-energy potential scattering in two and three dimensions”, *Journal of Mathematical Physics* **50**, 072105 (2009).
- [10] G. Lindblad, “On the generators of quantum dynamical semigroups”, *Commun. Math. Phys.* **48**, 119 (1976).
- [11] J. Dalibard, Y. Castin, K. Mølmer, “Wave-Function Approach to Dissipative Processes in Quantum Optics”, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 580 (1992); K. Mølmer, Y. Castin, J. Dalibard, “Monte Carlo Wavefunction Method in Quantum Optics”, *JOSA B* **10**, 524 (1993); K. Mølmer, Y. Castin, “Monte Carlo wavefunctions in quantum optics”, *Quantum Semiclass. Opt.* **8**, 49-72 (1996).