

Chapitre 1

Particules identiques en mécanique quantique

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

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

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

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

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

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

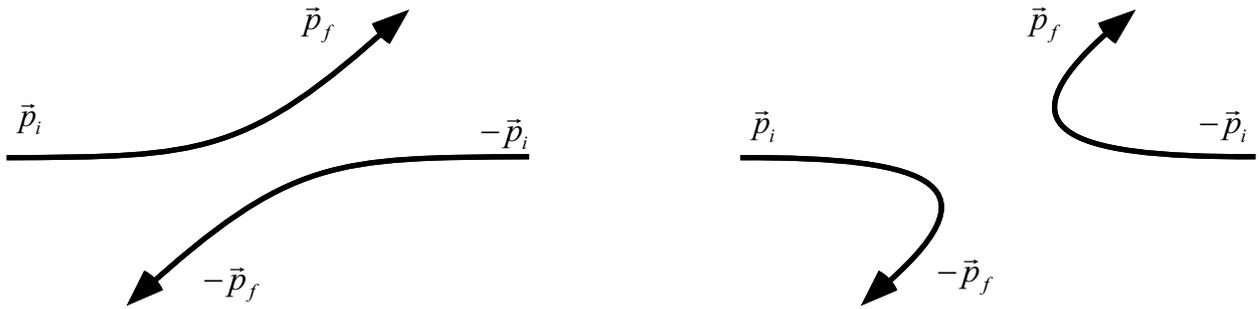


FIG. 1.1 – Choc entre deux particules identiques dans le référentiel du centre de masse

1.1 Le postulat de symétrisation

1.1.1 Énoncé

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

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

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

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

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

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

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

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

1.1.2 Remarques

Le théorème spin–statistique

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

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

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

Particules composites

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

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

1.1.3 Compatibilité avec l'équation de Schrödinger

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

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

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

On a alors

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

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

1.2 Construction d'une base de fonction d'onde

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

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

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

1.2.1 Cas de deux particules identiques

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

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

ou alors :

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

Pour des fermions, on doit prendre :

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

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

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

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

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

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

Notons χ_a et χ_b les deux fonctions d'espace.

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

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

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

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

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

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

et les trois états triplets :

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

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

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

1.2.2 Cas de N particules identiques

Le groupe symétrique

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Symétriseur et anti-symétriseur

On définit ces deux opérateurs par :

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

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

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

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

On vérifiera à titre d'exercice les propriétés suivantes :

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

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

Fonctions d'onde complètement symétriques ou antisymétriques

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

On a alors

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

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

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

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

1.3 Conséquences physiques du postulat de symétrisation

1.3.1 Collisions entre deux particules identiques

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.3.2 Interaction effective spin-spin

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

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

et

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

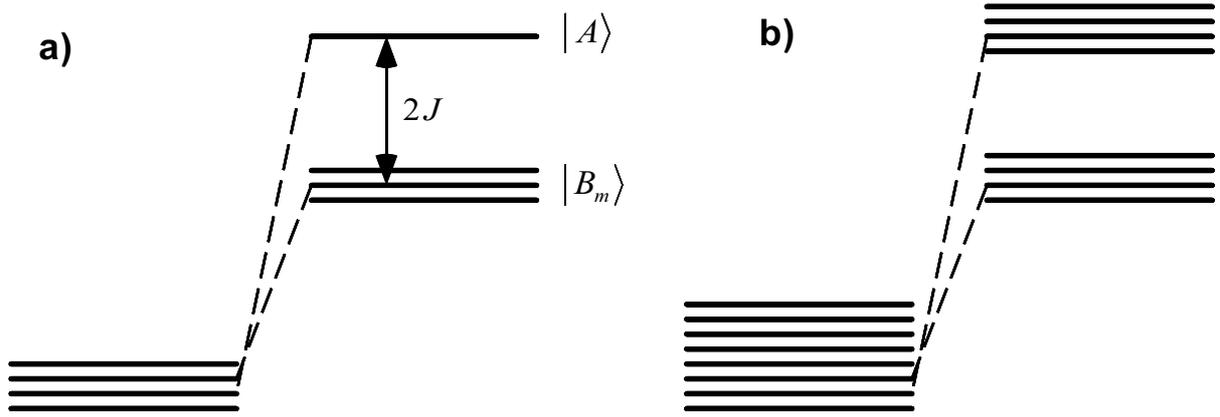


FIG. 1.3 – (a) Position des niveaux de la multiplicité $(1s,2s)$ de l'atome d'hélium lorsque l'interaction électrostatique entre électrons est prise en compte perturbativement. (b) Ce qui se passerait en l'absence du principe de Pauli.

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

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

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

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

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

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

1.3.3 L'émission stimulée

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

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

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

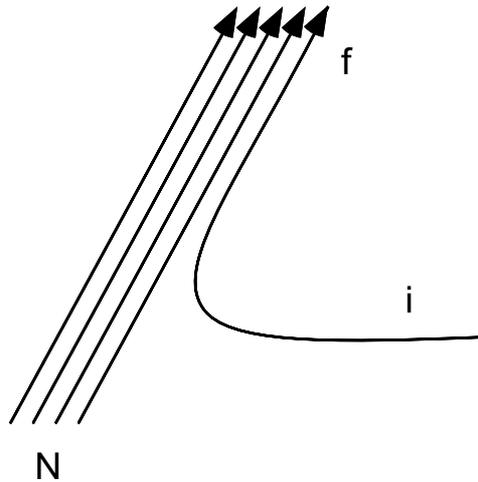


FIG. 1.4 – “Emission” stimulée (ou transfert stimulé) d’un boson dans un état déjà occupé.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.3.4 Statistiques quantiques

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

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

pour la statistique de Boltzmann et

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

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

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

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

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

de sorte que les collisions :

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

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

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

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

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

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

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

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

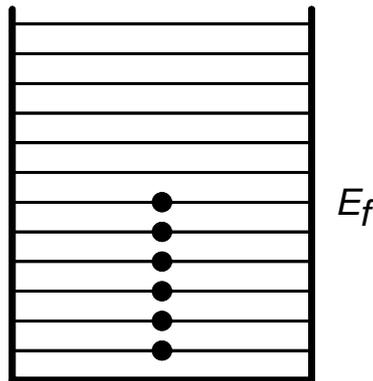
$$n_{\mathbf{p}_1} n_{\mathbf{p}_2} (1 + n_{\mathbf{p}'_1}) (1 + n_{\mathbf{p}'_2})$$

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

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

Le bilan détaillé impose alors :

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

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

soit

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

dont la solution est comme pour (1.55) :

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

ou encore :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

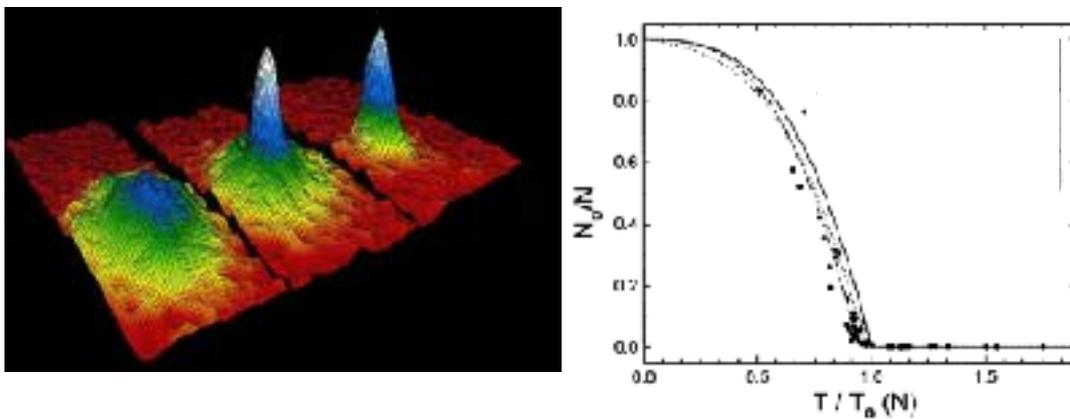


FIG. 1.6 – (a) Distribution en impulsion d'un gaz de bosons au dessus, au voisinage, et en dessous du seuil de condensation de Bose-Einstein. Pour la troisième image, la majeure partie des atomes (rubidium) est accumulée dans l'état fondamental du piège magnétique confinant le gaz. (b) Fraction condensée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

Chapitre 2

La seconde quantification

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

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

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

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

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

2.1.1 Définition

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

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

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

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

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

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

2.1.2 Opérateurs création et annihilation pour des bosons

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

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

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

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

pour l'opérateur destruction et

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Si $\mu = \nu$:

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

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

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

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

Par différence, on retrouve bien la relation cherchée.

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

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

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

2.1.3 Opérateurs création et annihilation pour des fermions

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

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

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

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

pour l'opérateur destruction et

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

et dans le second cas :

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

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

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

2.1.4 Remarques

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

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

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

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

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

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

2.1.5 L'opérateur champ

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

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

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

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

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

soit

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

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

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

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

Démontrons par exemple la troisième relation :

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

2.2 Les opérateurs en seconde quantification

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

2.2.1 Expression générale des opérateurs à une et deux particules

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ce qui donne :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.2.2 Exemples

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

L'expression recherchée est donc :

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

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

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

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

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

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

2.2.3 Utilisation de l'opérateur champ

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

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

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

soit :

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

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

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

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

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

pour les observables type “énergie potentielle” et

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.3 Lien avec la théorie des champs

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

2.3.1 Evolution temporelle de l’opérateur champ

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

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

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

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

L’hamiltonien en seconde quantification est donc :

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

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

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

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

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

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

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

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

ou encore :

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

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

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

2.3.2 Quantification du mouvement d'une corde vibrante

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

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

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

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

On en déduit l'équation d'onde :

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

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

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

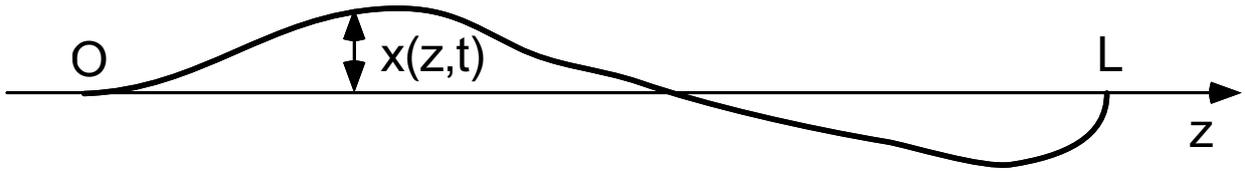


FIG. 2.2 – Mouvement d'une corde vibrante.

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

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

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

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

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

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

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

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

avec :

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

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

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

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

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

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

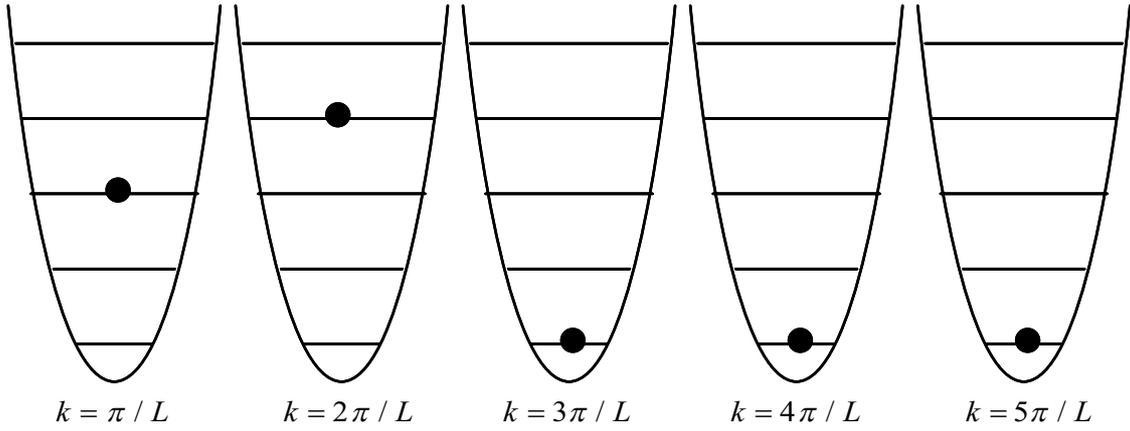


FIG. 2.3 – Représentation de l'état de la corde vibrante ; à chaque mode est associé un oscillateur harmonique quantifié.

soit

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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