

Aspects microlocaux de la mécanique quantique

(2021/22)

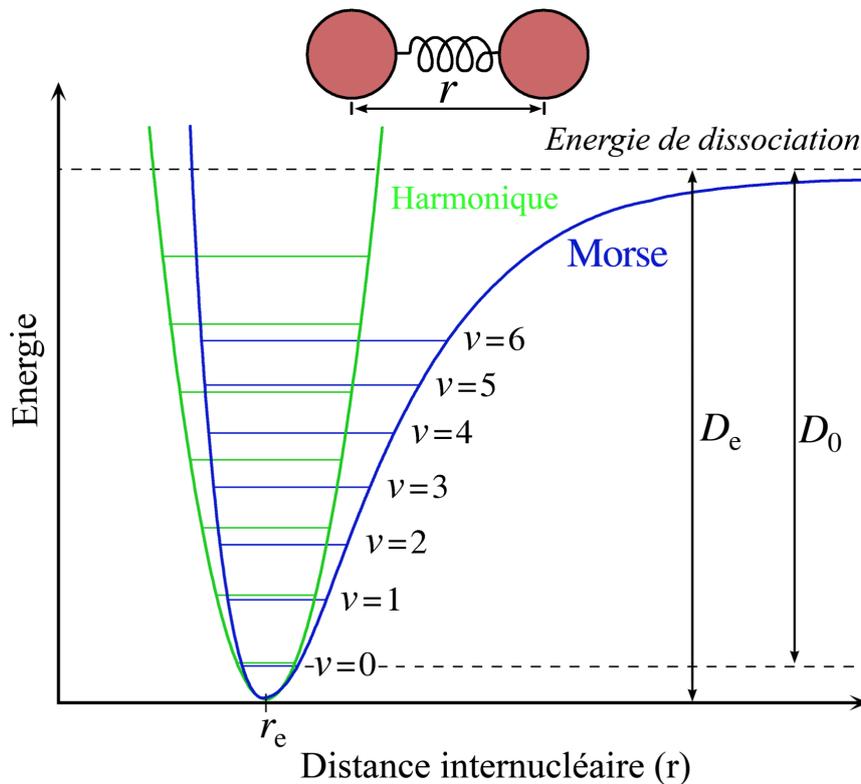
Leçon 2 sur l'oscillateur harmonique quantique

0. INTRODUCTION

Objectif: Connaître et savoir manipuler l'oscillateur harmonique quantique sous ses facettes à la fois algébriques (manipulation de valeurs propres issues d'opérateurs vérifiant les relations de commutation canonique) et analytiques (étude de fonctions propres obtenues en ayant recours à la représentation de Schrödinger).

Motivations: Un système évoluant dans un potentiel au voisinage d'une position d'équilibre stable, donc un minimum de potentiel, peut être modélisé par un oscillateur harmonique, du moins pour les petites oscillations. Le dessin ci-dessous affiche:

- la comparaison pour une molécule diatomique entre la courbe (en bleu) de potentiel "réel" (représenté par le potentiel de Morse) et celle (en vert) d'un oscillateur harmonique;
- les différences entre les niveaux d'énergie (quantiques) qui sont associés aux deux cas.



L'oscillateur harmonique quantique apparaît en physique de la matière condensée pour décrire les vibrations dans un solide cristallin sous la forme de **phonons**. Il fournit surtout un modèle de base pour appréhender les quanta d'énergie des rayonnements. On peut citer les **photons** de l'électromagnétisme mais aussi l'ensemble des **particules élémentaires** du **modèle standard**.

1. RÉFÉRENCES

- Pour une présentation plutôt analytique (et traitant des questions de domaine), voir:
[1] *C. Cheverry et N. Raymond, A Guide to Spectral Theory: Applications and Exercises*, paragraphes 2.6.3 et 6.2;
- Pour une discussion qui établit une comparaison avec le cas classique puis qui s'oriente vers une description des états cohérents, voir:
[2] *R. A. Bertlmann, Theoretical Physics T2, Quantum Mechanics*, chapter 5;
- Pour une visualisation et une comparaison des dynamiques classiques et quantiques, voir:
[3] *F. Faure, films d'animation*;
- Pour la description d'un ensemble d'applications:
[4] *F. Faure, Notes de cours sur la mécanique quantique* (chap. 2);
- Pour des compléments utiles, instructifs et très agréables à lire sur l'étude spectrale du Laplacien avec diverses conditions au bord, voir:
[5] *M. Lewin, Eléments de théorie spectrale: le Laplacien sur un ouvert borné*.

2. CONTEXTE HISTORIQUE

L'oscillateur harmonique s'est d'abord imposé comme étant très utile pour la description de différents types de pendules (paragraphe 2.1). Sa version quantique a d'abord permis d'expliquer les spectres d'émission des atomes. Elle a ensuite joué un rôle essentiel pour la formulation quantique de l'interaction des radiations et de la matière, d'abord en électrodynamique quantique (paragraphe 2.2) puis en théorie quantique des champs.

2.1. **Le système masse-ressort.** En mécanique classique, une particule de position $q \in \mathbb{R}^d$ et de masse m se déplace dans un référentiel galiléen en obéissant au principe fondamental de la dynamique (les fameuses lois du mouvement de Newton):

La dérivée de la quantité de mouvement $p = m\dot{q}$ est égale à la somme des forces extérieures qui s'exercent sur la particule.

Lorsque ces forces se réduisent à une force conservative qui dérive d'un potentiel $V(q)$, on obtient les équations canoniques de Hamilton:

$$(2.1) \quad \begin{cases} \dot{q} = p/m = \nabla_p H, \\ \dot{p} = -\nabla_q V(q) = -\nabla_q H, \end{cases}$$

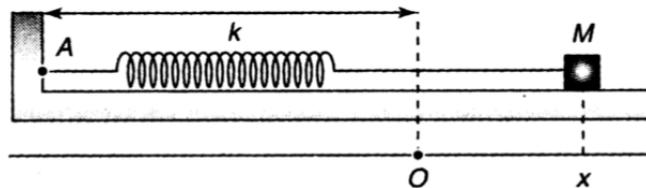
qui mettent en jeu l'hamiltonien

$$H(q, p) := V(q) + \frac{|p|^2}{2m}.$$

Au voisinage d'une position d'équilibre (disons placée en l'origine $q = 0$) en laquelle $\nabla_q V(0) = 0$, on peut approcher la fonction potentielle par son développement limité:

$$V(q) = V(0) + \frac{1}{2} {}^t_q D_q^2 V(0) q + o(|q|^2).$$

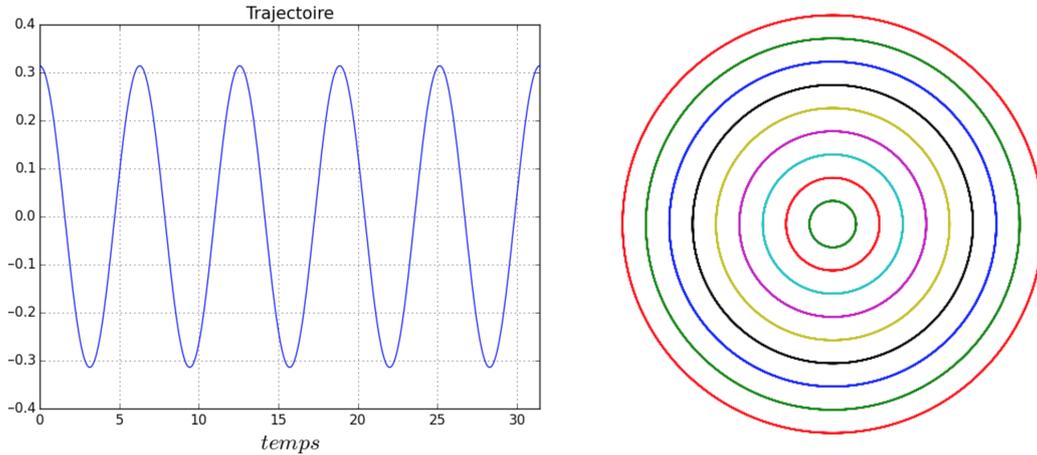
Près d'un minimum non dégénéré, la forme quadratique associée à $D_q^2 V(0)$ est définie positive. En première approximation, on peut donc remplacer $V(q)$ par son développement à l'ordre deux. En particulier pour le système masse-ressort horizontal non amorti ($d = 1$), on récupère $V(q) = kq^2/2$ où k est le coefficient de raideur.



Pour un tel choix, les solutions de (2.1) satisfont à:

$$(2.2) \quad \ddot{q} + \omega_0^2 q = 0, \quad \omega_0 := \sqrt{k/m}.$$

Celles qui sont issues (avec une vitesse nulle) de la position q_0 à l'instant $t = 0$ sont de la forme $q(t) = q_0 \cos(\sqrt{mk}t)$. Les trajectoires tracées en position seule (en projection suivant q) ou dans l'espace des phases (en p et q) ressemblent respectivement aux dessins de gauche (oscillations) et de droite (cercles concentriques dans le portrait de phase) suivants:



2.2. Vers un modèle quantique. Le cas d'un minimum stable est très courant en mécanique quantique car, à basse température, les particules ont tendance à se mettre près de leur position d'équilibre qui est la position de plus basse énergie. Comme on l'a déjà expliqué, la (première) quantification de l'hamiltonien classique consiste à remplacer les variables q et p par les opérateurs de position $Q = q \times$ et d'impulsion $P = -i\hbar \partial_q$ vérifiant la relation de commutation canonique $[P, Q] = -i\hbar Id$. On est ainsi amené à considérer l'opérateur:

$$(2.3) \quad H := (Q^2 + P^2)/2.$$

Dès lors, l'équation qui vient se substituer à (2.2) n'est autre que l'équation de Schrödinger:

$$(2.4) \quad 2i\hbar \partial_t \psi = \hbar (-\partial_q^2 + q^2) \psi.$$

Ce modèle (2.4) obtenu par analogie avec (2.2) est appelé **oscillateur harmonique quantique**. Il décrit l'évolution d'une particule quantique *isolée*. Pour simplifier, on va travailler en dimension un et sous une forme normalisée (avec $\hbar = 1$). Il faut toutefois garder à l'esprit que les échelles de grandeur sont essentielles pour les interprétations physiques.

Remark 1 (Retour vers le **théorème d'Ehrenfest**). *On peut associer à (2.4) une donnée initiale choisie sous la forme du **paquet d'onde gaussien**:*

$$\psi(0, x) = \psi_0(x) := \frac{1}{(\pi \sigma^2)^{1/4}} \exp\left(i \frac{p_0 x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (x_0, p_0, \sigma) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_+^*.$$

Les valeurs moyennes $\langle Q \rangle(0)$ et $\langle P \rangle(0)$ des observables Q et P contre l'état ψ_0 sont alors:

$$\langle Q \rangle(0) = \langle \psi_0, Q \psi_0 \rangle = \int_{\mathbb{R}} x |\psi_0(x)|^2 dx = x_0, \quad \langle P \rangle(0) = \langle \psi_0, P \psi_0 \rangle = i\hbar \int_{\mathbb{R}} p \bar{\psi}_0(x) \psi_0'(x) dx = p_0.$$

On peut montrer, par exemple en calculant le noyau du propagateur, que la solution de (2.4) reste à tout instant $t \in \mathbb{R}_+^*$ une gaussienne (de paramètres x_t , p_t et σ). Pour la déterminer, il suffit d'avoir accès à

$$x_t := \langle Q \rangle(t), \quad p_t := \langle P \rangle(t).$$

On dispose pour cela d'un moyen très pratique: le théorème d'Ehrenfest. En effet, dans le cas de l'énergie quadratique (2.3), on a $\langle V'(Q) \rangle = \langle Q \rangle$ de sorte que:

$$\begin{cases} \dot{x}_t = p_t/m, \\ \dot{p}_t = -q_t. \end{cases}$$

Le mouvement des moyennes est alors celui d'une particule classique autour de laquelle les états gaussiens se propagent sans déformation (voir [3] pour des simulations).

L'intérêt pour (2.4) remonte aux travaux du physicien britannique P. Dirac qui, pendant les années 1920, a été le premier à établir le coefficient de l'émission spontanée d'un atome. Le recours à l'équation (2.4) va permettre de conceptualiser l'interaction des radiations et de la matière. En particulier, P. Dirac va modéliser le champ électromagnétique (voir [4]-paragraphe 2.2.4 pour de plus amples précisions) en utilisant un ensemble d'oscillateurs harmoniques discrets (indexés par les vecteurs d'onde) et en associant aux particules les **opérateurs d'échelle**:

$$\begin{aligned} a &:= (Q + iP)/\sqrt{2}, & \text{opérateur d'annihilation,} \\ c &:= a^* = (Q - iP)/\sqrt{2}, & \text{opérateur de création.} \end{aligned}$$

Ceux-ci permettent de décomposer H comme indiqué ci-dessous.

Lemma 2. *L'opérateur H s'écrit $H = N + (Id/2)$ où $N := ca = a^*a$ est appelé l'opérateur de "nombre total de particules".*

Preuve. Par définition:

$$H = \frac{1}{2} (Q - iP)(Q + iP) - \frac{i}{2} [Q, P] = a^*a - \frac{i}{2} \times i Id = N + (Id/2).$$

□

L'opérateur H apparaît ainsi comme un opérateur symétrique vérifiant (pour toute fonction ψ de classe C^∞ à support compact):

$$(2.5) \quad \langle \psi, H\psi \rangle = \|a\psi\|^2 + \frac{1}{2} \|\psi\|^2 \geq \frac{1}{2} \|\psi\|^2.$$

C'est un opérateur non borné sur $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$. Il devient auto-adjoint à condition toutefois de bien spécifier son domaine. On renvoie à [1]-paragraphe 2.6.3 puis 6.2.1 ainsi qu'à [5]-paragraphe 12 pour des caractérisations possibles du domaine de H . Le choix suivant convient:

$$\text{Dom } H = \{ \psi \in L^2(\mathbb{R}); \partial_q \psi \in L^2(\mathbb{R}), \partial_{qq}^2 \psi \in L^2(\mathbb{R}), q^2 \psi \in L^2(\mathbb{R}) \}.$$

Puisque H est autoadjoint, son spectre $\sigma(H)$ est réel [1,7]. Il en va de même de son spectre ponctuel $\sigma_p(H)$. La minoration (2.5) permet même d'affirmer que:

$$\sigma_p(H) \subset \sigma(H) \subset [1/2, +\infty[.$$

Les éléments λ de $\sigma_p(H)$ peuvent être interprétés comme des quantas d'énergie. Le **postulat 3** de la mécanique quantique affirme en effet que ce sont les seules énergies mesurables. D'où l'enjeu de connaître toutes les valeurs propres λ de l'opérateur H ainsi que toutes les fonctions propres ψ_λ de H . On note E_λ l'espace propre de H associé à λ . Il faut garder à l'esprit que l'équation (2.4) admet pour solutions particulières:

$$(2.6) \quad \psi(t) = e^{-i\lambda t} \psi_\lambda, \quad \forall \psi_\lambda \in E_\lambda := \{ \psi \in \text{Dom } H; (H - \lambda Id)\psi = 0 \}.$$

Remark 3 (États stationnaires). *Physiquement, les fonctions d'ondes ψ et $\mu\psi$ pour $\mu \in \mathbb{C}^*$ représentent un même état physique. Ce qui importe, c'est la densité de probabilité induite par la fonction ψ , celle obtenue en normalisant ψ dans $L^2(\mathbb{R})$. Le vecteur ψ doit donc être interprété comme un élément de l'espace projectif complexe $P(\mathcal{H})$. Vue sous cet angle, la rotation subie au cours du temps par ψ_λ au niveau de (2.6) n'a pas d'effet physique. C'est pourquoi on dit parfois que les solutions décrites par (2.6) sont des états stationnaires.*

Conformément à cette idée, on peut d'ailleurs noter que, pour les états quantiques ψ obtenus en (2.6), la valeur moyenne de toute observable $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ne change pas puisque:

$$\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle e^{-i\lambda t} \psi_\lambda | A | e^{-i\lambda t} \psi_\lambda \rangle = \langle \psi_\lambda | A | \psi_\lambda \rangle.$$

En préalable, commençons par vérifier que la borne inférieure $1/2$ autorisée ci-dessus pour les valeurs spectrales est effectivement dans $\sigma_p(H)$. Pour cela, on cherche à identifier l'ensemble des vecteurs propres ψ_0 correspondants. Compte tenu du Lemme 2, cela revient à résoudre:

$$(-\partial_q + q)(\partial_q + q)\psi_0 = 0, \quad \psi \in \text{Dom } H,$$

ce qui implique

$$\langle \psi_0, (-\partial_q + q)(\partial_q + q)\psi_0 \rangle = \langle (\partial_q + q)\psi_0, (\partial_q + q)\psi_0 \rangle = \|(\partial_q + q)\psi_0\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 = 0$$

ou encore

$$(2.7) \quad (\partial_q + q)\psi_0 = 0.$$

Les fonctions $\psi_0(q) = Ce^{-q^2/2}$ avec $C \in \mathbb{C}$ sont (par le théorème de Cauchy-Lipschitz) les seules solutions de (2.7). Et il se trouve qu'elles sont dans $\text{Dom } H$. Elles conviennent donc tout à fait.

(2.8) *L'espace propre $E_{1/2}$ associé à la valeur propre $1/2$ est de dimension un.*

L'espace propre $E_{1/2}$ est engendré par une gaussienne appelée l'état **fondamental** parce qu'elle correspond à l'état de plus basse énergie. En physique quantique, l'énergie du vide n'est jamais nulle (en l'occurrence, elle vaut $1/2$ dans des unités ad hoc)!

Remark 4. *La situation classique est différente. En effet, un ressort placé en sa position d'équilibre avec une vitesse nulle possède une énergie totale égale à zéro. Ce phénomène est donc purement quantique et tout à fait remarquable. Il est à l'origine des fluctuations quantiques dont une manifestation est la création spontanée d'une paire virtuelle constituée d'une particule et d'une antiparticule. Le lecteur trouvera dans [2]-paragraphe 5.1.2 une comparaison intéressante des configurations classiques et quantiques.*

Pour conclure cette introduction, soulignons que les prévisions fournies par le recours à l'oscillateur harmonique quantique est en accord avec des manifestations expérimentales parmi lesquelles on peut mentionner:

- le **décalage de Lamb** non prévu par Dirac et d'abord calculé par H. Bethe. Celui-ci est dû à l'interaction entre les fluctuations quantiques du vide et l'électron de l'hydrogène;
- la **force de Casimir**, voir [4]-paragraphe 2.2.4.

Cette théorie conduit en particulier à un domaine de recherche très porteur, l'**optique quantique**, qui a été récompensé ces dernières années par de nombreux Prix Nobel de physique avec parmi les lauréats récents: S. Haroche, D. Wineland, R. J. Glauber ou encore C. Cohen-Tannoudji.

3. L'OSCILLATEUR HARMONIQUE QUANTIQUE

L'objectif de cette partie est de montrer, que le recours aux ψ_λ permet une décomposition spectrale exhaustive de H . Dans cette perspective, le théorème de Stone Von Neumann est utile parce qu'il permet d'aborder l'étude spectrale de H en sachant a priori que les approches de type Heisenberg et Schrödinger sont toutes les deux équivalentes. Ainsi, les renseignements obtenus par les méthodes algébriques (paragraphe 3.1) et analytiques (paragraphe 3.2) se complètent pour donner une vision globale. Il se trouve que certaines difficultés sont plus faciles ou plus rapides à résoudre d'un côté que de l'autre. Par exemple, l'approche algébrique présentée ci-dessous ne permet pas de clore le sujet. On prendra soin de souligner par la mention **An★** avec $\star \in \mathbb{N}^*$ les arguments utilisés relevant de l'analyse.

3.1. L'approche algébrique. L'approche algébrique consiste à gérer la discussion spectrale au travers des opérateurs de position $Q = q \times$ et d'impulsion $P = -i\partial_q$ qui sont vus sous l'angle de leurs relations algébriques:

$$(3.1) \quad P = P^*, \quad Q = Q^*, \quad H = (Q^2 + P^2)/2, \quad [P, Q] = -i Id$$

On ne précise pas ici l'espace de Hilbert \mathcal{H} sur lequel agit H , et on fait l'impasse (pour l'instant) sur les questions de domaine (toutefois signalées par [An*](#)).

An1: On complète (3.1) en ajoutant la condition préliminaire (2.8), à savoir:

$$(3.2) \quad \dim E_{1/2} = \dim \ker (H - 1/2) = 1.$$

D'après le Lemme 2, étudier H revient (modulo la soustraction de $1/2$) à étudier les propriétés de l'opérateur de *nombre total de particules* N . La condition (3.2) se traduit par $\dim \ker N = 1$. L'espace propre de N est engendré par un vecteur $\psi_0 \neq 0$ (avec ψ_0 dans le domaine de H). Comme

$$0 = \langle \psi_0 | N \psi_0 \rangle = \langle a \psi_0 | a \psi_0 \rangle = \| a \psi_0 \|^2,$$

ce vecteur ψ_0 est aussi dans le noyau de a . Comme $\ker a \subset \ker N$, le noyau de a est de dimension un, engendré par ψ_0 .

Lemma 5 (La relation de commutation canonique interprétée au niveau de c et de a). *On a: $[a, c] = Id$. Plus généralement, pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, on a:*

$$(3.3) \quad [a, c^n] = n c^{n-1}.$$

Preuve. Le calcul fournit

$$[a, c] = \frac{1}{2} [Q + iP, Q - iP] = \frac{i}{2} [P, Q] - \frac{i}{2} [Q, P] = Id.$$

Supposons (3.3) vérifié au cran n . Alors:

$$[a, c^{n+1}] = [a, c^n] c + c^n [a, c] = n c^{n-1} c + c^n c = (n+1) c^n,$$

ce qui prouve le résultat par récurrence. □

Lemma 6. *Les vecteurs $\psi_n := c^n \psi_0$ avec $n \in \mathbb{N}$, parfois juste notés $|n\rangle$, sont des vecteurs propres de N associés à la valeur propre n . Ils sont deux à deux orthogonaux.*

An2: Rien ne garantit *a priori* que ψ_n - et en particulier ψ_0 - soit dans le domaine de N . Cette hypothèse, considérée comme implicitement satisfaite ici, se vérifie facilement par l'analyse.

Preuve. Par définition de ψ_0 , c'est vrai pour $n = 0$. On commence par établir les relations:

$$(3.4) \quad [N, a] = [c, a]a = -a, \quad [N, c] = -c[c, a] = c.$$

Puis on procède par récurrence. Sachant que $N \psi_n = n \psi_n$, on récupère:

$$N \psi_{n+1} = [N, c] \psi_n + c N \psi_n = c \psi_n + n c \psi_n = (n+1) \psi_{n+1},$$

et ainsi de suite. Par ailleurs, pour $n \neq m$, on a

$$\langle \psi_n, N \psi_m \rangle = m \langle \psi_n, \psi_m \rangle = \langle N^* \psi_n, \psi_m \rangle = \langle N \psi_n, \psi_m \rangle = n \langle \psi_n, \psi_m \rangle,$$

ce qui fournit l'orthogonalité. □

L'opérateur c est dit de *création* ("raising" en anglais) car il permet de faire apparaître à partir de l'état fondamental ψ_0 le n^{iem} quantum d'énergie par sauts successifs d'un cran.

Lemma 7 (Spectre entier). *L'opérateur N n'admet pas de valeurs propres en dehors de \mathbb{N} .*

Preuve. Supposons que $\lambda \notin \mathbb{N}$ soit une valeur propre de N associée à un vecteur propre $\psi_\lambda \neq 0$. Comme $N = a^*a$ est positif, on a nécessairement $\lambda > 0$. D'après (3.4), on a

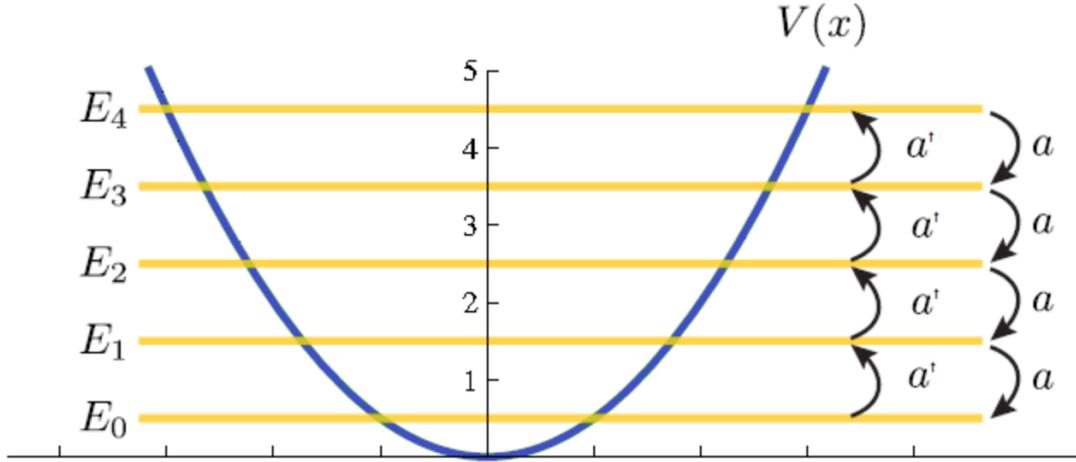
$$N a\psi_\lambda = [N, a]\psi_\lambda + aN\psi_\lambda = (\lambda - 1) a\psi_\lambda.$$

On sait que $a\psi_\lambda \neq 0$ car sinon $\psi_\lambda = C\psi_0$ de sorte que $\lambda = 0$, ce qui est interdit. On veut itérer cet argument.

An3: Cela requiert de savoir que les $a\psi_\lambda, a^2\psi_\lambda, \dots$ successifs sont bien dans le domaine de a . De nouveau, cette hypothèse (considérée comme implicitement satisfaite ici) se vérifie facilement par l'analyse.

Le vecteur $a^m\psi_\lambda$ avec $m = \lfloor \lambda \rfloor + 1$ fournit un vecteur propre de valeur propre $\lambda - m$ avec (puisque λ n'est pas un entier) l'encadrement $-1 < \lambda - m < 0$. L'existence d'une telle valeur propre négative est une contradiction. □

L'opérateur a est dit d'*annihilation* ("lowering" en anglais) car, comme le révèle la preuve ci-dessus, son application permet de baisser le niveau d'énergie d'un cran. Partant de ψ_n , on retourne à l'état fondamental au bout de n itérations répétées ($a^n\psi_n \sim \psi_0$) puis on finit par tomber sur le vecteur nul (puisque $a^m\psi_n = 0$ pour $m > n$).



Lemma 8. *Toutes les valeurs propres (entières) de N sont de multiplicité un.*

Preuve. Pour $n = 0$, la dimension du noyau de N vaut 1 du fait de l'hypothèse (3.2). Supposons avoir établi que la dimension de $\ker(N - jId)$ soit 1 pour tout $j \leq n$, c'est à dire:

$$\forall j \in \{0, \dots, n\}, \quad \ker(N - jId) = \{C\psi_j; C \in \mathbb{C}\}.$$

Soit alors ψ un vecteur propre de N associé à la valeur propre $n + 1$. On vient de voir que $a\psi$ est un vecteur propre associé à la valeur propre n , donc de la forme $a\psi = C\psi_n$. On applique c pour récupérer:

$$ca\psi = N\psi = (n + 1)\psi = Cc\psi_n = C\psi_{n+1},$$

ce qui prouve que ψ doit être colinéaire à ψ_{n+1} . □

Remark 9. *L'action de c, a, N et H visualisée en terme de matrices, c'est à dire conformément au point de vue de Heisenberg, est développée dans [2]-paragraphe 5.1.4. Les fonctions propres de a appelées états cohérents sont décrites dans [2]-partie 5.2.*

À ce stade, on dispose d'une description exhaustive du spectre ponctuel $\sigma_p(H)$ de H . On a comme toujours $\sigma_p(H) \subset \sigma(H)$. Mais a-t'on $\sigma_p(H) = \sigma(H)$?

Soit G l'adhérence de l'espace vectoriel engendré par les ψ_n . Si $G = \mathcal{H}$, c'est terminé. Sinon, par construction, l'espace G est stable par a et a^* . Son supplémentaire orthogonal G^\perp est donc invariant sous l'action de a^* et de a , et par là sous celle de $N = a^*a$. On peut dès lors considérer la restriction de N à G^\perp , et envisager de répéter la procédure précédente. Ce raisonnement se heurte (de nouveau) à des considérations de domaine. Par ailleurs, on ne dispose plus forcément pour $N|_{G^\perp}$ d'un amorçage du type (3.2). Pour compléter notre étude, on a besoin d'avoir recours à des arguments analytiques.

3.2. L'approche analytique. Les arguments analytiques consistent à travailler avec:

$$H = -\partial_q^2 + q^2, \quad \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}).$$

Cela permet de combler les lacunes signalées ci-dessus tout en apportant une intuition plus concrète. Cela présente aussi l'avantage de dégager d'autres perspectives.

Comme H est à résolvante compacte [1], on peut directement affirmer que le spectre de H est entièrement discret et formé d'une suite de valeurs propres λ_n qui tendent vers $+\infty$. Celles-ci sont les $\lambda_n = n + (1/2)$. Il reste maintenant à prouver que les ψ_n pour $n \in \mathbb{N}^*$ forment une base de $L^2(\mathbb{R})$. La démonstration est détaillée dans [1]-paragraphe 6.2.2. Elle n'est pas reproduite ici.

3.3. Compléments d'information. L'objectif de ce paragraphe est de fournir quelques pistes de développements possibles:

- Les fonctions ψ_n qui s'appellent **fonctions d'Hermite** sont dessinées dans [2]-figure 5.1;
- La référence [3] permet de mieux comprendre pourquoi il est utile de représenter la mécanique quantique dans l'espace des phases. Elle fournit aussi via des modélisation une intuition de divers phénomènes tels que: l'étalement de la fonction d'onde (qui est dû à la dispersion), l'**effet tunnel** ou encore le **chaos quantique**;
- Les vecteurs ψ_n jouent aussi un rôle crucial du point de vue de la transformation de Fourier \mathcal{F} . Ils permettent en effet de diagonaliser l'action de \mathcal{F} selon $\mathcal{F}(\psi_n) = i^n \psi_n$. Cela peut se voir via la **transformée de Bargmann** (ou comment voir L^2 comme un espace de fonctions analytiques).
- La **théorie quantique des champs** décrit l'évolution des particules tout en incorporant la possibilité de leur apparition ou de leur disparition lors de processus d'interaction. Pour cela, elle fait intervenir des champs à valeurs opérateurs. La partie "champ" vérifie des équations de propagation (de type onde, Dirac, ...). La partie "opérateur" fait intervenir les opérateurs de création et d'annihilation. Pour prendre en compte l'existence possible d'une infinité de particules quantiques obéissant à des règles de symétrie (pour les bosons) ou d'antisymétrie (pour les fermions), on a recours à une **seconde quantification**. Les opérateurs d'échelle sont alors vus comme agissant sur des **espaces de Fock**. L'article de P. A. M. Dirac paru en 1949 aux Annales de l'IHP en présente les idées et les résultats fondamentaux.

4. UN PAS VERS L'ÉLECTROMAGNÉTISME QUANTIQUE

On dispose maintenant d'assez de matériel pour décrire (du moins en partie) les idées permettant de passer d'une description classique du champ électromagnétique à sa conception quantique.

4.0.1. *Les équations de Maxwell.* Ces équations ont été proposées en 1861 par **J. C. Maxwell**. Le champ électrique $\mathbf{E}(t, x)$ est un vecteur de \mathbb{R}^3 dont l'évolution (dans le vide) est pilotée par l'équation des ondes suivante (où c est la **vitesse de la lumière**):

$$(4.1) \quad (\partial_{tt}^2 - c^2 \Delta_x) \mathbf{E} = 0.$$

Remark 10 (Première quantification). *L'équation de Schrödinger ne convient pas d'un point de vue relativiste (même si $V \equiv 0$, elle n'est pas invariante par le groupe de Lorentz). En relativité restreinte, on travaille avec le quadrivecteur (E, p) qui se contracte dans la métrique de Lorentz*

pour faire apparaître la masse (au repos) des particules. Cela donne la relation de dispersion liant l'énergie E à l'impulsion p comme étant:

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4.$$

Une autre approche consiste à écrire "l'équation de Schrödinger" qui est associée à ce nouvel hamiltonien. C'est celle qui est obtenue à l'aide d'une (première) quantification remplaçant E et p par leurs observables quantiques (qui sont $-i\hbar\partial_t$ et $-i\partial_x$) ce qui conduit à l'équation de Klein-Gordon:

$$(\partial_{tt}^2 - c^2 \Delta_x + (m^2 c^4 / \hbar^2))\psi = 0.$$

Pour $m = 0$ (comme pour les photons), si on considère la fonction d'onde ψ comme un champ scalaire réel se propageant dans le vide, on retrouve (4.1).

Etant donnée une direction $k \in \mathbb{R}^3$, on cherche les solutions de (4.1) qui sont de type onde plane, c'est à dire qui sont de la forme

$$\mathbf{E}(t, x) = g(\omega t - k \cdot x), \quad g \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}; \mathbb{R}^3).$$

Après substitution, cela conduit à la relation de dispersion

$$\omega(k) = \pm c |k|.$$

La loi de Gauss impose de plus

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = -k \cdot g'(\omega t - k \cdot x) = 0,$$

ce qui signifie que g' pointe dans une direction appartenant au plan orthogonal à k dont on peut sélectionner une base orthonormée (e_1, e_2) . Ainsi, modulo une constante, on a

$$g(z) = g_1(z) e_1 + g_2(z) e_2, \quad g_i \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}; \mathbb{R}).$$

Par une analyse de Fourier discrète lorsqu'on dispose de conditions au bord (onde piégée dans une boîte) ou global sinon, on peut décomposer les g_i en somme de cosinus et de sinus. Comme toute onde polarisée elliptique peut être décomposée en deux composantes linéaires qui elles mêmes peuvent se décomposer en la somme de deux ondes polarisées circulaire (l'une droite, l'autre gauche), on aboutit à des briques élémentaires formées (modulo des déphasages) d'ondes planes de polarisation circulaire du type

$$(4.2) \quad g_1 = E \cos(\omega(k)t - k \cdot x), \quad g_2 = \pm E \sin(\omega(k)t - k \cdot x)$$

où le scalaire $E \in \mathbb{R}_+$ a le statut d'une énergie tandis que le signe \pm renvoie à une polarisation droite (pour $+$) et gauche (pour $-$). Les différents types de polarisation sont détaillés (dessins à l'appui) dans ce [texte](#) tandis que les mécanismes de superposition des ondes sont expliqués dans ce [lien](#). Pour un [photon](#), il n'y a que deux [hélicités](#) possibles qui correspondent aux deux états possibles de polarisation circulaire du photon (horaire $+$ et anti-horaire $-$) et qui proviennent après projection d'une observable quantique (le spin).

La dynamique de l'onde (4.2) est celle d'un mouvement circulaire de rayon E . Le rayonnement électromagnétique classique dans le vide est donc équivalent à la somme indicée par k (vecteur d'onde) d'oscillateurs harmoniques classiques qu'il faut doubler du fait de l'hélicité (\pm). On obtient ainsi l'espace des phases classique

$$2 \bigoplus_{k \in \mathbb{R}^3} \mathbb{R}_{p_k, q_k}^2$$

avec en correspondance pour chaque k l'hamiltonien classique $(p_k^2 + \omega(k)^2 q_k^2)/2$. Précisément, l'idée est de ne pas autoriser toutes les énergies E en remplaçant cette description par son analogue quantique. Au final, l'espace quantique total \mathcal{H} et son hamiltonien H sont respectivement

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{k \in \mathbb{R}^3} (L^2(\mathbb{R}_{q_k}) \otimes \mathbb{C}^2), \quad H = \sum_{k \in \mathbb{R}^3} \frac{1}{2} (-\partial_{q_k}^2 + \omega(k)^2 q_k^2),$$

où \mathbb{C}^2 est introduit pour prendre en compte le spin (1/2) de l'électron (ou l'état de polarisation). Il y a d'autres complications (non mentionnées) dues à la nécessité de prendre en compte la présence simultanée de plusieurs photons ainsi que leur création et annihilation (c'est la seconde quantification).