

Physique quantique : l'aventure collective

Jean-Pierre Chabert

Table des matières

1	Avertissement	2
2	Rayonnement du corps noir : la formule de Rayleigh-Jeans	3
3	Rayonnement du corps noir : la formule de Planck	10
4	L'effet photoélectrique	14
5	L'atome de Bohr	14
6	Louis de Broglie et la mécanique ondulatoire	17
7	La fonction d'onde de Schrödinger	18
8	L'effet tunnel	24
9	L'atome selon Schrödinger	31
10	La théorie des lacunes	33
11	L'oscillateur harmonique et l'énergie du point zéro	34
12	Les relations d'incertitude de Heisenberg	42
13	L'électrodynamique quantique	47
14	Le principe d'équipartition	53
15	La statistique de Bose-Einstein	56
16	La statistique de Fermi-Dirac	60
17	Les condensats de Bose-Einstein	63
18	L'effet Casimir	65
19	Polarisation, inégalité de Bell	79

1 Avertissement

Ce document fait partie d'un ensemble centré sur la gravitation, comportant plusieurs volets, dont certains, à première vue, ne sont pas directement liés à la gravitation, mais qui seront supposés connus par la suite :

- 01) Gravitation relativiste : introduction
 - Relativité restreinte :
- 02) Les vitesses en Relativité restreinte
 - Physique quantique :
- 03) Physique quantique : généralités
- 04) Physique quantique : l'aventure collective
 - Gravitation :
- 05) Gravitation et critère de Schild
- 06) Gravitation relativiste : principes fondamentaux
- 07) L'hypothèse du champ d'entraînement
- 08) Métriques et géodésiques
- 09) Tenseur de Ricci
- 10) Potentiel gravitationnel
- 11) Ni ou Schwarzschild ?
- 12) Gravitation et vide quantique
- 13) Etude du système solaire en métrique de Ni
- 14) Etude des systèmes binaires en métrique de Ni
- 15) Trous noirs et trous gris
- 16) Ondes gravitationnelles
- 17) Gravitation et cosmologie

Pourquoi présenter ici un sujet aussi connu que l'histoire des débuts de la physique quantique? C'est, en partie, pour montrer le rôle central d'Einstein dans cette aventure collective, avant qu'il ne se lance dans l'aventure solitaire de la relativité générale. C'est aussi pour "préparer le terrain", car, en étudiant la gravitation, nous aurons à rechercher ses connexions possibles avec la physique quantique. Pour cela, il faut faire un élagage des concepts et des interprétations. On a dit beaucoup de choses, justes ou fausses, parfois contradictoires, sur la physique quantique, et il vaut mieux avoir des idées simples et claires avant d'y faire référence. Les thèmes qui sont traités ici sont bien connus : on pourra trouver des exposés et des calculs complets sur divers sites internet ; nous apportons notre éclairage personnel, de la manière la plus cohérente possible.

2 Rayonnement du corps noir : la formule de Rayleigh-Jeans

À la fin du dix-neuvième siècle, certains physiciens s'imaginaient que la physique était presque achevée. Mais il restait quelques problèmes mineurs à résoudre. En particulier, la "catastrophe ultraviolette", qui était apparue dans l'étude du corps noir.

Un corps noir est un corps qui absorbe toute l'énergie électromagnétique qu'il reçoit. Cette énergie alimente l'agitation thermique, qui à son tour entraîne l'émission d'un rayonnement purement thermique (non pollué par des phénomènes de réflexion ou de diffusion).

La théorie du corps noir étudie la courbe de ce rayonnement thermique (luminance en fonction de la longueur d'onde), à l'équilibre. Actuellement, c'est la loi de Planck qui nous donne la meilleure description de cette courbe; auparavant, la loi de Rayleigh et Jeans (déjà très astucieuse) décrivait bien la réalité pour des longueurs d'onde suffisamment grandes, mais s'en écartait pour les faibles longueurs d'onde; c'est ce qu'on a appelé la "catastrophe ultraviolette". L'idée géniale de Planck a été de considérer des échanges d'énergie quantifiés entre les électrons ou les atomes, ce qui l'a conduit à une nouvelle loi de répartition des niveaux d'énergie, bien différente de l'équipartition admise jusqu'alors. C'est ce qui lui a permis de résoudre le problème de la catastrophe ultraviolette.

Commençons par la loi de Rayleigh et Jeans, qui permet de bien situer le problème.

On imagine une enceinte cubique vide chauffée (un "four"); on note L la longueur d'une arête. L'agitation thermique des atomes des parois produit l'émission d'ondes électromagnétiques. On cherche à décrire une situation d'équilibre, pour une température donnée.

La première idée de Rayleigh et Jeans est d'imaginer les échanges d'énergie entre les atomes, par l'intermédiaire d'ondes électromagnétiques. Ils supposent qu'à l'équilibre les ondes résultantes sont stationnaires ; leur phase s'annule (à π près) sur les parois. On va donc pouvoir utiliser l'analogie des cordes vibrantes, mais en trois dimensions. Plus exactement, on va décomposer ces ondes en une somme d'ondes progressives élémentaires, dirigées selon les trois axes (x, y, z) du cube.

Quelle interprétation faut-il donner à ces ondes ? Avec le recul, en s'appuyant sur la physique quantique (qui n'existait pas encore à l'époque), on peut les considérer comme virtuelles et évanescentes. Elles gèrent les échanges d'énergie entre les parois opposées de l'enceinte. Ces échanges sont des "collapses", des effondrements de fonctions d'onde, se produisant selon une loi probabiliste, et obéissant au principe d'immédiateté. Il ne faudrait pas croire que chaque onde élémentaire, présente à chaque instant à l'intérieur de l'enceinte, correspond à un photon qui circulerait au même instant entre les parois opposées : il y aurait alors, dans l'enceinte, à chaque instant, autant de photons que d'ondes élémentaires. Certains sont même allés jusqu'à imaginer un "gaz de photons", ou un vide peuplé d'oscillateurs harmoniques ayant un statut équivalent à celui des particules réelles. C'est faux : chaque onde élémentaire n'est qu'une "possibilité" de photon, ou, mieux, une possibilité d'échange. Chaque échange est une réalisation d'une possibilité, mais le nombre d'échanges par unité de temps va dépendre, en particulier, de la température. Raisonner sur de telles ondes, c'est raisonner sur des "possibilités" d'échanges ; mais rappelons-nous que les possibles interfèrent...

Revenons au calcul de Rayleigh et Jeans. Chacune de ces ondes élémentaires possède un vecteur d'onde :

$$\vec{k} = \frac{\omega}{c} \cdot \vec{u} = \frac{2 \cdot \pi \cdot \nu}{c} \cdot \vec{u} = \frac{2 \cdot \pi}{\lambda} \cdot \vec{u},$$

où ω est la pulsation de l'onde ($\omega = \frac{2 \cdot \pi}{T} = 2 \cdot \pi \cdot \nu = \frac{2 \cdot \pi \cdot c}{\lambda}$), et où \vec{u} est un vecteur unitaire représentant la direction de l'onde (vecteur perpendiculaire au front d'onde) : $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$, avec $u_x^2 + u_y^2 + u_z^2 = 1$.

On a :

$$\|\vec{k}\| = \frac{\omega}{c} = \frac{2 \cdot \pi \cdot \nu}{c} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}.$$

On peut définir aussi le quadrivecteur d'onde :

$$\tilde{k} = \frac{\omega}{c} \cdot (1, \vec{u}) = \frac{\omega}{c} \cdot (1, u_x, u_y, u_z) = \frac{2 \cdot \pi \cdot \nu}{c} \cdot (1, u_x, u_y, u_z).$$

La norme de ce quadrivecteur est : $\|\tilde{k}\| = \frac{\omega}{c} \cdot \sqrt{1 - (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)} = 0$. Il s'agit donc d'un quadrivecteur de type lumière.

Si on note $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ la constante de Planck réduite, on a :

$$\hbar \vec{k} = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi \cdot \nu}{c} \cdot \vec{u} = \frac{h \cdot \nu}{c} \cdot \vec{u}.$$

Il s'agit de l'impulsion associée à l'onde (ou au photon).

D'autre part : $\hbar \cdot \omega = \frac{h}{2\pi} \cdot 2\pi \cdot \nu = h \cdot \nu$. Il s'agit de l'énergie associée à cette onde.

Mais cette façon de présenter le vecteur d'onde (et le quadrivecteur d'onde) insiste sur la constante de Planck, qui était alors inconnue.

Selon l'idée de Rayleigh et Jeans, chaque onde élémentaire parcourt donc un nombre entier de demi-longueurs d'onde pour aller d'une face de l'enceinte à la face opposée : c'est ici le point crucial, qui permet de passer du continu au dénombrable. Le problème est donc posé en termes d'oscillateur harmonique : les échanges d'énergie entre les atomes sont gérés par un système d'ondes stationnaires vibrant à une certaine fréquence fondamentale, mais aussi, en même temps, à toutes les fréquences multiples de la fréquence fondamentale (les harmoniques).

Que sont, exactement, ces oscillateurs ? On pourrait dire que ce sont les atomes (ou particules) de la paroi du four qui vibrent. C'est vrai, mais ce n'est pas suffisant, car ils ne vibrent pas indépendamment les uns des autres : ils vibrent collectivement en échangeant de l'énergie. Ce sont ces échanges qui jouent le rôle central. Le problème du corps noir consiste à rechercher un ordre dans ce désordre, un équilibre dans le mouvement. L'idée, très remarquable, de Rayleigh et Jeans est de traiter ce problème en termes de mécanique ondulatoire (plus précisément en termes d'ondes stationnaires), et, en même temps, d'introduire une forme de quantification (car ces ondes stationnaires sont dénombrables).

Si une onde progressive élémentaire est dirigée selon l'axe des x , sa demi-longueur d'onde $\frac{\lambda}{2}$ doit diviser L , donc il doit exister un entier naturel non nul m_x tel que : $L = m_x \cdot \frac{\lambda}{2}$, donc : $\lambda = \frac{2 \cdot L}{m_x}$ et $\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{c \cdot m_x}{2 \cdot L}$. Le vecteur d'onde de cette onde élémentaire pourra s'écrire : $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \vec{u} = \frac{\pi \cdot m_x}{L} \cdot \vec{u}$. Il y a deux sens possibles pour ce vecteur unitaire \vec{u} , selon le sens de déplacement de l'onde. Si \vec{u}_x est le vecteur de base du repère dirigé selon l'axe des x , on aura $\vec{u} = \pm \vec{u}_x$; on pourrait donc écrire, en principe : $\vec{k} = \frac{\pi \cdot m_x}{L} \cdot \vec{u}_x$, mais avec $m_x \in Z^*$.

De même, si l'onde progressive élémentaire est dirigée selon l'axe des y (resp. z), son vecteur d'onde s'écrira : $\vec{k} = \frac{\pi \cdot m_y}{L} \cdot \vec{u}_y$ (resp. $\vec{k} = \frac{\pi \cdot m_z}{L} \cdot \vec{u}_z$), avec $m_y, m_z \in Z^*$.

Dans le cas général, une onde progressive quelconque piégée dans l'enceinte

aura pour vecteur d'onde :

$$\vec{k} = \frac{\pi}{L} \cdot (m_x \cdot \vec{u}_x + m_y \cdot \vec{u}_y + m_z \cdot \vec{u}_z) \quad (m_x, m_y, m_z \in Z, \text{ non tous nuls}).$$

La fréquence de cette onde sera égale à la norme de son vecteur d'onde, soit :

$$\nu(m_x, m_y, m_z) = \frac{c}{2L} \cdot \|\vec{k}\| = \frac{c}{2L} \cdot \sqrt{m_x^2 + m_y^2 + m_z^2}.$$

A cette époque, selon le principe de l'équipartition de l'énergie mis en évidence par Boltzmann, on admettait que toutes les situations possibles devaient être équiprobables, donc, dans le cas présent, que toutes les valeurs possibles des entiers relatifs m_x , m_y et m_z étaient équiprobables. Le problème était seulement de les compter.

Considérons une fréquence ν fixée. Combien existe-t-il, dans l'enceinte, de modes de vibration de fréquence $\nu(m_x, m_y, m_z) \leq \nu$?

On doit avoir : $\nu(m_x, m_y, m_z) = \frac{c}{2L} \cdot \sqrt{m_x^2 + m_y^2 + m_z^2} \leq \nu$, donc :

$$\sqrt{m_x^2 + m_y^2 + m_z^2} \leq \frac{2L\nu}{c}.$$

Le problème revient à chercher le nombre de points à coordonnées entières dans une boule de rayon $R = \frac{2L\nu}{c}$. Une approximation de ce nombre est donnée par le volume de la boule :

$$V = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R^3 = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{2L\nu}{c} \right)^3 = \frac{32\pi L^3 \nu^3}{3c^3}.$$

Cette approximation est peu précise pour de petites valeurs de ν , mais l'erreur relative tend vers 0 quand ν tend vers l'infini.

Remarquons, en particulier, que, puisque m_x , m_y , m_z sont trois entiers non tous nuls, on a nécessairement :

$$1 \leq \sqrt{m_x^2 + m_y^2 + m_z^2} \leq \frac{2L\nu}{c} = \frac{2L}{\lambda},$$

ce qui entraîne :

$$\nu \geq \frac{c}{2L} \quad \text{et} \quad \lambda \leq 2L.$$

Par conséquent, on doit garder à l'esprit que, dans ce contexte, les ondes stationnaires de longueur d'onde supérieure à $2L$ (ou de fréquence inférieure à $\frac{c}{2L}$) n'existent pas.

Comme nous travaillons sur une situation d'équilibre, avec des ondes stationnaires, à toute onde progressive élémentaire de vecteur d'onde \vec{k} correspond

une autre onde progressive de vecteur d'onde $-\vec{k}$, les deux contribuant à une même onde stationnaire élémentaire, avec $m_x \in N^*$. Autrement dit, nous ne devons pas tenir compte du sens de parcours selon l'axe des x , des y ou des z ; nous devons donc diviser par 8 le nombre de combinaisons. D'autre part, nous n'avons pas tenu compte de la polarisation des ondes, qui peut prendre deux valeurs. Il faut donc multiplier le nombre de combinaisons (ou modes de vibration) par 2. Ce nombre, pour une fréquence inférieure à ν , est donc :

$$N_{(\text{fréquence} \leq \nu)} = \frac{8 \cdot \pi \cdot L^3 \cdot \nu^3}{3 \cdot c^3}.$$

Ce nombre est proportionnel à L^3 , c'est-à-dire au volume de l'enceinte. Pour un volume unitaire ($L = 1$), ce nombre devient :

$$N_{(\text{fréquence} \leq \nu, v=1)} = \frac{8 \cdot \pi \cdot \nu^3}{3 \cdot c^3},$$

ou, en fonction de la longueur d'onde ($\nu = \frac{c}{\lambda}$) :

$$N_{(\text{longueur d'onde} \geq \lambda, v=1)} = \frac{8 \cdot \pi}{3 \cdot \lambda^3}.$$

Pour estimer la probabilité que la fréquence d'une onde stationnaire soit égale à ν (par unité de volume), on procède par dérivation :

$$P(\nu) = \frac{d}{d\nu} \left(\frac{8 \cdot \pi \cdot \nu^3}{3 \cdot c^3} \right) = \frac{8 \cdot \pi \cdot \nu^2}{c^3}.$$

Pour estimer la probabilité que la longueur d'onde d'une onde stationnaire soit égale à λ (par unité de volume), on procède de même :

$$P(\lambda) = \frac{d}{d\lambda} \left(\frac{8 \cdot \pi}{3 \cdot \lambda^3} \right) = -\frac{8 \cdot \pi}{\lambda^4}.$$

Par ailleurs, on sait que l'énergie rayonnée à la température T (attention : ne pas confondre avec la période), par unité de temps, est proportionnelle à $k_B \cdot T$, où k_B est la constante de Boltzman ; plus précisément, on pourrait dire que l'énergie moyenne d'un oscillateur est : $\langle E \rangle = k_B \cdot T$ (selon la mécanique classique). On peut en conclure que la puissance rayonnée par un corps noir, à la température T , est proportionnelle à :

$$P(\nu) \cdot k_B \cdot T = \frac{8 \cdot \pi \cdot \nu^2}{c^3} \cdot k_B \cdot T$$

$$P(\lambda) \cdot k_B \cdot T = -\frac{8 \cdot \pi}{\lambda^4} \cdot k_B \cdot T.$$

La luminance spectrale énergétique L_λ (puissance rayonnée par unité d'angle solide), à une température T donnée, s'obtient en divisant ce résultat par $4 \cdot \pi$

(angle solide de la sphère entière) ; on obtient alors la formule de Rayleigh-Jeans sous sa forme usuelle :

$$L_\nu(T) = \frac{2 \cdot \nu^2}{c^3} \cdot k_B \cdot T ;$$

$$L_\lambda(T) = \frac{2}{\lambda^4} \cdot k_B \cdot T.$$

Comme nous l'avons déjà dit, les prévisions basées sur cette formule sont excellentes pour les grandes longueurs d'onde, très mauvaises pour les petites longueurs d'onde. Ce problème était prévisible, puisqu'il est parfaitement clair que le nombre $N_{(\text{longueur d'onde} \geq \lambda, \nu=1)} = \frac{8 \cdot \pi}{3 \cdot \lambda^3}$ diverge quand $\lambda \rightarrow 0$. L'idée de l'équipartition de l'énergie, ou plutôt l'interprétation qui en a été faite par Raleigh et Jeans, n'est pas du tout réaliste ! C'est ce qu'on a appelé la "catastrophe ultraviolette".

Mais avant d'étudier la formule de Planck, ajoutons un petit complément sur celle de Rayleigh et Jeans. La démonstration habituelle fait intervenir une enceinte cubique, mais reprenons le calcul avec une enceinte en forme de parallélépipède rectangle de dimensions L_x , L_y et L_z .

Une onde progressive quelconque piégée dans l'enceinte aura pour vecteur d'onde :

$$\vec{k} = \pi \cdot \left(\frac{m_x}{L_x} \cdot \vec{u}_x + \frac{m_y}{L_y} \cdot \vec{u}_y + \frac{m_z}{L_z} \cdot \vec{u}_z \right) \quad (m_x, m_y, m_z \in \mathbb{Z}, \text{ non tous nuls}).$$

La fréquence de cette onde sera égale à la norme de son vecteur d'onde, soit :

$$\nu(m_x, m_y, m_z) = \frac{c}{2 \cdot \pi} \cdot \|\vec{k}\| = \frac{c}{2} \cdot \sqrt{\left(\frac{m_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{m_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{m_z}{L_z}\right)^2}.$$

Considérons une fréquence ν fixée. Combien existe-t-il, dans l'enceinte, de modes de vibration de fréquence $\nu(m_x, m_y, m_z) \leq \nu$?

On doit avoir : $\nu(m_x, m_y, m_z) = \frac{c}{2} \cdot \sqrt{\left(\frac{m_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{m_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{m_z}{L_z}\right)^2} \leq \nu$, donc :

$$\sqrt{\left(\frac{m_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{m_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{m_z}{L_z}\right)^2} \leq \frac{2 \cdot \nu}{c}.$$

Comme m_x , m_y et m_z sont trois entiers non tous nuls, on a nécessairement :

$$\nu \geq \min\left(\frac{c}{2 \cdot L_x}, \frac{c}{2 \cdot L_y}, \frac{c}{2 \cdot L_z}\right) \quad \text{et} \quad \lambda \leq \max(2 \cdot L_x, 2 \cdot L_y, 2 \cdot L_z).$$

Les points de coordonnées $\left(\frac{m_x}{L_x}, \frac{m_y}{L_y}, \frac{m_z}{L_z}\right)$ vérifiant cette égalité se trouvent à l'intérieur de la sphère de rayon $\frac{2 \cdot \nu}{c}$. Le problème est que leurs coordonnées

ne sont pas entières, ce qui ne permet pas de les compter facilement. Pour les rendre entières, nous allons faire trois homothéties, selon l'axe des x (coefficient : L_x), selon l'axe des y (coefficient : L_y) et selon l'axe des z (coefficient : L_z). Les coordonnées de nos points sont maintenant (m_x, m_y, m_z) - donc entières. Mais la sphère de rayon $\frac{2\nu}{c}$ s'est transformée en un ellipsoïde dont les demi-axes ont pour mesures $\frac{2\nu L_x}{c}$, $\frac{2\nu L_y}{c}$ et $\frac{2\nu L_z}{c}$. Une approximation du nombre de points à coordonnées entières va être donnée par le volume de cet ellipsoïde, qui est :

$$V = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{2L_x \nu}{c} \right) \cdot \left(\frac{2L_y \nu}{c} \right) \cdot \left(\frac{2L_z \nu}{c} \right) = \frac{32\pi \nu^3}{3c^3} \cdot L_x \cdot L_y \cdot L_z.$$

On obtient donc :

$$N(\text{fréquence} \leq \nu) = \frac{8\pi \nu^3}{3c^3} \cdot L_x \cdot L_y \cdot L_z ;$$

$$dN(\text{fréquence} = \nu) = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} \cdot L_x \cdot L_y \cdot L_z \cdot d\nu.$$

Amusons-nous à utiliser ici la formule $E_\nu = h\nu$, encore inconnue de Rayleigh et Jeans. L'énergie totale de tous ces oscillateurs doit être :

$$dE(\text{fréquence} = \nu) = dN(\text{fréquence} = \nu) \cdot h\nu = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \cdot L_x \cdot L_y \cdot L_z \cdot d\nu.$$

Intégrons de 0 à ν :

$$E(\text{fréquence} \leq \nu) = \int_0^\nu \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \cdot L_x \cdot L_y \cdot L_z \cdot d\nu = \frac{2\pi h \nu^4}{c^3} \cdot L_x \cdot L_y \cdot L_z.$$

Ce qu'on peut écrire aussi, en remplaçant ν par $\frac{c}{\lambda}$:

$$E(\text{long. d'onde} \geq \lambda) = \frac{2\pi h c}{\lambda^4} \cdot L_x \cdot L_y \cdot L_z.$$

Si $L_x = L_y = L_z = L$, on retrouve la situation étudiée précédemment.

Si on fait tendre λ vers 0, E diverge. C'est évidemment une anomalie, puisque nous parlons d'échanges d'énergie entre atomes constituant le corps noir : le nombre d'atomes est fini, et chaque échange énergétique est fini.

Mais la formule ci-dessus a un autre défaut : la température T a disparu ! Précédemment, nous avions effectué une multiplication par l'énergie moyenne des oscillateurs : $k_B T$, selon la technique de Rayleigh et Jeans ; mais ici nous avons déjà pris en compte l'énergie individuelle $h\nu$ des oscillateurs !

En plus, nous avons parachuté ici la constante h , qui était encore inconnue de Rayleigh et Jeans ; nous avons fait un amalgame de classique et de quantique, qui n'a rien de cohérent.

Comment corriger ces erreurs ? Une idée de Wien est d'introduire une exponentielle décroissante : $L_\nu(T) = A.\nu^3.e^{-\frac{B.\nu}{T}}$; cette astuce permet de résoudre le problème pour les hautes fréquences (il n'y a plus de divergence), mais cette formule ne convient pas pour les basses fréquences.

C'est Planck qui a accompli le pas décisif, en 1900 : il poursuit l'étude de Rayleigh et Jeans, basée sur les oscillateurs harmoniques quantifiés (électrons, atomes... ou autres ?), et introduit sa fameuse constante : h .

3 Rayonnement du corps noir : la formule de Planck

Dans un milieu en équilibre thermodynamique de type corps noir, pour un oscillateur harmonique de fréquence fondamentale ν , l'excitation de niveau n (ou l'énergie $E_n = n.h.\nu$) pourrait bien avoir une probabilité proportionnelle à :

$$e^{-\beta.E_n} = e^{-n.\beta.h.\nu}$$

où $\beta = \frac{1}{k_B.T}$, k_B étant la constante de Boltzmann et T la température absolue (en Kelvin).

Cette idée, imaginée par Planck, est une adaptation de celle de Wien ; elle va se révéler d'une grande richesse (même s'il convient de la réinterpréter), et elle va être l'un des points d'ancrage de la physique quantique naissante.

Suivons donc le fil, et examinons pour commencer où peut nous conduire cette idée.

Dans la suite de nos calculs, nous poserons : $x = \beta.h.\nu$ et $y = e^x = e^{\beta h \nu}$.

D'autre part, dans le but de calibrer les probabilités (dont la somme doit être égale à 1), on introduit :

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n.\beta.h.\nu} = \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-\beta.h.\nu})^n = \frac{1}{1 - e^{-\beta.h.\nu}} = \frac{e^{\beta.h.\nu}}{e^{\beta.h.\nu} - 1},$$

ou, si on préfère :

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{y^n} = \frac{1}{1 - \frac{1}{y}} = \frac{y}{y - 1}.$$

Au niveau d'excitation n est donc associée la probabilité :

$$P(n) = \frac{e^{-n.\beta.h.\nu}}{Z} = (1 - e^{-\beta.h.\nu}) . e^{-n.\beta.h.\nu},$$

ou encore :

$$P(n) = \frac{\frac{1}{y^n}}{\frac{y}{y-1}} = \frac{y-1}{y} \cdot \frac{1}{y^n} = \left(1 - \frac{1}{y}\right) \cdot \frac{1}{y^n} = \frac{1}{y^n} - \frac{1}{y^{n+1}}.$$

On a donc, bien entendu :

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(n) = \left(1 - \frac{1}{y}\right) \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{y^n} = \left(1 - \frac{1}{y}\right) \cdot \frac{1}{1 - \frac{1}{y}} = 1,$$

ou, si on préfère :

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(n) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{y^n} - \frac{1}{y^{n+1}}\right) = 1.$$

On peut poser :

$$P_{(n < N)} = P(0) + P(1) + \dots + P(N-1) = 1 - \frac{1}{y^N};$$

$$P_{(n < N)} = 1 - \frac{1}{(e^{\beta \cdot h \cdot \nu})^N} = 1 - e^{-N \cdot \beta \cdot h \cdot \nu} = 1 - e^{-\frac{N \cdot \beta \cdot h \cdot c}{\lambda}}.$$

Ceci peut s'écrire :

$$P_{(\text{énergie} < E)} = 1 - e^{-N \cdot \beta \cdot h \cdot \nu} = 1 - e^{-\beta \cdot E};$$

$$P_{(\text{énergie} \geq E)} = e^{-\beta \cdot E}.$$

Le coefficient $e^{-\beta \cdot E}$ désigne donc la probabilité que l'énergie d'un oscillateur appartenant au corps noir de température $T = \frac{1}{\beta \cdot k_B}$ soit supérieure ou égale à E .

On peut préférer mettre la fréquence en valeur. On écrira alors (en notant ν la fréquence de vibration effective de l'oscillateur, et non sa fréquence fondamentale) :

$$P_{(\text{fréquence} < \nu)} = 1 - e^{-\beta \cdot h \cdot \nu};$$

$$P_{(\text{fréquence} \geq \nu)} = e^{-\beta \cdot h \cdot \nu}.$$

Pour calculer la probabilité que la fréquence de vibration effective de l'oscillateur soit comprise entre ν et $\nu + d\nu$, on dérive l'une de ces deux égalités (nous choisissons la première) :

$$dP(\nu) = d(1 - e^{-\beta \cdot h \cdot \nu}) = \beta \cdot h \cdot e^{-\beta \cdot h \cdot \nu} \cdot d\nu,$$

ou encore :

$$dP(E) = d(1 - e^{-\beta \cdot E}) = \beta \cdot e^{-\beta \cdot E} \cdot dE.$$

Dans le spectre du corps noir, l'énergie totale des oscillateurs situés entre E et $E + dE$ est donc : $E.dP(E) = E.\beta.e^{-\beta.E}.dE$.

Il est intéressant de rechercher le maximum de la fonction $E.\frac{dP}{dE}$:

$$E.\frac{dP}{dE} = E.\frac{d}{dE} (1 - e^{-\beta.E}) = E.\beta.e^{-\beta.E}.$$

Pour trouver son maximum, on dérive cette fonction :

$$\frac{d}{dE} (E.\beta.e^{-\beta.E}) = \beta. (e^{-\beta.E} - \beta.E.e^{-\beta.E}) = \beta. (1 - \beta.E).e^{-\beta.E}.$$

Cette dérivée s'annule pour $\beta.E = 1$, autrement dit : $E = \frac{1}{\beta} = k_B.T$. Donc pour $E = k_B.T$, la fonction $E.\frac{dP}{dE}$ atteint son maximum, qui est : $\frac{1}{e}$.

On peut s'intéresser aussi à l'énergie moyenne d'un oscillateur de fréquence fondamentale ν . C'est une espérance au sens probabiliste :

$$\langle E_\nu \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n.P(n) = \sum_{n=0}^{\infty} n.h.\nu. (1 - e^{-\beta.h.\nu}).e^{-n.\beta.h.\nu} ;$$

$$\langle E_\nu \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n.x}{\beta} \cdot \left(1 - \frac{1}{y}\right) \cdot \frac{1}{y^n} = \frac{x}{\beta} \cdot \left(1 - \frac{1}{y}\right) \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{y^n} ;$$

$$\langle E_\nu \rangle = \frac{x.(y-1)}{\beta} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{y^{n+1}}.$$

Comme $\frac{n}{y^{n+1}} = -\frac{d(y^{-n})}{dy}$, on a :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{y^{n+1}} = -\frac{d}{dy} \sum_{n=0}^{\infty} y^{-n} = -\frac{d}{dy} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{y}\right)^n = -\frac{d}{dy} \left(\frac{1}{1-\frac{1}{y}}\right) ;$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{y^{n+1}} = -\frac{d}{dy} \left(\frac{y}{y-1}\right) = \frac{1}{(y-1)^2} ;$$

$$\langle E_\nu \rangle = \frac{x.(y-1)}{\beta} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{y^{n+1}} = h.\nu.(y-1) \cdot \frac{1}{(y-1)^2} = \frac{h.\nu}{y-1} ;$$

$$\langle E_\nu \rangle = \frac{h.\nu}{e^{\beta.h.\nu} - 1} = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{x}{e^x - 1} = k_B.T \cdot \frac{x}{e^x - 1}.$$

Insistons sur le fait que l'oscillateur dont il s'agit a pour fréquence fondamentale ν , et peut adopter toutes les fréquences $n.\nu$, multiples de ν (ses harmoniques), selon son niveau d'excitation n , tout en respectant la loi probabiliste découverte par Planck. Il faut donc se rappeler que dans l'énergie moyenne $\langle E_\nu \rangle$ sont comptabilisées non seulement les vibrations de fréquence ν , mais

aussi toutes leurs harmoniques.

On peut remarquer que, lorsque ν tend vers 0 (ou λ vers l'infini), T étant fixé, alors x tend vers 0, $e^x - 1$ est équivalent à x , et $\langle E_\nu \rangle$ tend vers $k_B \cdot T$.

Lorsque ν tend vers l'infini (ou λ vers 0), T étant toujours fixé, alors x tend vers l'infini, et $\langle E_\nu \rangle$ tend vers 0.

Selon la loi de Rayleigh-Jeans, comme on l'a vu, la luminance spectrale énergétique $L_\lambda(T)$ du rayonnement thermique du corps noir, en fonction de la longueur d'onde λ , à une température T fixée, est donnée par la formule :

$$L_\lambda(T) = \frac{2}{\lambda^4} \cdot k_B \cdot T = \frac{2}{\lambda^4 \cdot \beta}.$$

Dans cette formule, l'énergie moyenne d'un oscillateur quelconque figure sous la forme : $\langle E \rangle = k_B \cdot T = \frac{1}{\beta}$. Il suffit de remplacer cette expression par celle qui a été expliquée ci-dessus pour obtenir la formule de Planck :

$$L_\lambda(T) = \frac{2}{\lambda^4} \cdot \langle E_\nu \rangle = \frac{2}{\lambda^4} \cdot \frac{h \cdot \nu}{e^{\beta \cdot h \cdot \nu} - 1} = \frac{2 \cdot h \cdot c}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\beta \cdot h \cdot c}{\lambda}} - 1}.$$

De manière presque miraculeuse, à condition de calibrer correctement la constante h , cette formule permet d'éviter la "catastrophe ultraviolette", et coïncide exactement avec les observations sur l'ensemble du spectre! Planck nomme "quantum d'action" la quantité $h \cdot \nu$: c'est l'acte de naissance de la physique quantique.

Mais il faut bien dire que les explications laissent à désirer : pourquoi comptabiliser avec l'énergie E_ν les énergies de toutes ses harmoniques? Planck a trouvé la bonne formule, mais il ne l'a pas vraiment comprise! Pour la comprendre vraiment, il faudra attendre l'interprétation de Bose, qui va "transformer l'essai" (voir plus loin).

Un autre "défaut" de l'explication de Planck est le flou qui règne sur la notion d'oscillateur. A cette époque, certains physiciens ont pensé que ces mystérieux oscillateurs résidaient dans le vide à l'intérieur de l'enceinte. N'oublions pas que la formule de Planck date de 1900, et que la découverte de l'électron par Thompson date de 1899. En 1900, on connaissait donc son existence, mais sa présence et son rôle dans les atomes n'allaient être clarifiés qu'en 1913, grâce au modèle atomique de Bohr. Aujourd'hui, avec le recul, on peut considérer que les oscillateurs de Rayleigh, Jeans et Planck s'identifient aux électrons qui tournent autour des noyaux atomiques dans les parois du four, et qui échangent de l'énergie électromagnétique, à distance, par l'intermédiaire de "photons". Le photon qui, d'ailleurs, n'avait pas encore été théorisé. Patience, il arrive. Et c'est Einstein qui entre sur le terrain.

4 L'effet photoélectrique

Lorsqu'un matériau est la cible d'un faisceau d'ondes électromagnétiques, en présence d'une différence de potentiel, on peut dans certains cas obtenir un courant électrique.

L'étude de cet effet a été difficile, car l'électron n'avait pas encore été découvert, et la notion de photon était encore inconnue. Mais en quelques années les idées se sont croisées. On considère que c'est Heinrich Hertz qui a découvert et exploité cet effet vers 1887, mais sans en comprendre le fonctionnement. En 1888, Wilhem Hallwachs comprend que, sous l'effet des radiations, le matériau émet des charges négatives. En 1899, Joseph John Thompson découvre l'électron. En 1900, Philipp Lenard comprend que les charges négatives de Hallwachs sont les électrons de Thompson. La même année, Max Planck formule sa célèbre loi du corps noir, et introduit sa constante h . En 1905, Einstein se passionne pour les travaux sur le corps noir, et en particulier pour le "quantum d'action" de Planck : le produit $h\nu$ qui figure dans sa formule correspond au quantum d'énergie d'un faisceau lumineux de fréquence ν , ce qui signifie que l'énergie transmise par ce faisceau aux atomes de la cible est nécessairement un multiple de $h\nu$, comme si l'onde lumineuse était composée d'unités ayant toutes cette même énergie. Einstein introduit la notion de "quantum de lumière", qu'on appellera plus tard photon. Pour éjecter un électron d'un atome de la cible, un photon doit avoir une énergie supérieure à l'énergie de liaison $W_0 = h\nu_0$, et l'énergie cinétique de l'électron arraché sera alors : $W = h\nu - h\nu_0$. Tout ceci est, en définitive, extrêmement simple : il fallait agencer correctement les pièces du puzzle. Simple mais audacieux, car la lumière était alors considérée comme purement ondulatoire, et, à elles seules, les ondes ne pouvaient pas expliquer l'effet photoélectrique. En 1916, les expériences de Robert Andrews Millikan permettront de conclure définitivement que l'explication d'Einstein est exacte. Cette explication fait apparaître une idée nouvelle pour l'époque : la dualité onde/corpuscule.

5 L'atome de Bohr

Dans un atome d'hydrogène, le noyau est constitué d'un unique proton (charge : +e) ; autour de celui-ci tourne un unique électron (charge : -e). D'après la loi de Coulomb, cet électron est attiré par le noyau avec une force $F = K \frac{e^2}{r^2}$. La constante K est connue : $K = \frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0}$. On note m_e la masse de l'électron.

Sur ces bases, il est tentant de construire un modèle de l'atome d'hydrogène inspiré de celui du système solaire dans la théorie de Newton.

Mais l'étude du spectre de l'hydrogène montre des raies (d'absorption ou d'émission, selon les cas) dont les longueurs d'onde sont déjà bien connues à

cette époque. Selon la loi empirique de Rydberg, les fréquences associées à ces raies vérifient : $\nu = R_y \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$, où R_y est la constante de Rydberg. Pour $n_1 = 1$ et $n_2 > 1$, on a la série de Lyman ; pour $n_1 = 2$ et $n_2 > 2$, la série de Balmer ; pour $n_1 = 3$ et $n_2 > 3$, la série de Paschen ; etc. On comprend que ces radiations sont émises (ou absorbées) quand l'électron saute d'une orbite permise à une autre, d'un niveau d'énergie à un autre. Cette situation s'écarte sensiblement du modèle du système solaire, dans lequel toutes les orbites sont à priori permises. Ici, il n'y a que des niveaux discrets d'énergie autorisés. La quantification, encore...

Dans un mouvement circulaire uniforme, la force centrifuge est toujours égale à $\frac{m_e \cdot v^2}{r}$; dans le cas présent, la force d'attraction entre le noyau et l'électron est $F = K \cdot \frac{e^2}{r^2}$. Pour que les deux s'équilibrent, on doit avoir :

$$\frac{m_e \cdot v^2}{r} = K \cdot \frac{e^2}{r^2} ;$$

$$v^2 = K \cdot \frac{e^2}{m_e \cdot r}.$$

Deux mystères demeurent : quelles sont, exactement, les orbites autorisées, et pourquoi ? D'autre part, la théorie classique de l'électromagnétisme prévoit qu'un électron subissant une accélération doit rayonner de l'énergie de manière continue, d'où une instabilité des orbites... L'électron devrait tomber vers le noyau !

Les réflexions de Bohr, croisées avec celles de de Broglie, vont conduire à cette idée : à l'électron est associée une "onde de matière" de longueur d'onde λ , et une orbite n'est stable que si l'onde est stationnaire ; pour cela, la longueur de l'orbite ($2 \cdot \pi \cdot r$) doit être un multiple de la longueur d'onde (λ) :

$$2 \cdot \pi \cdot r = n \cdot \lambda.$$

De plus, on doit avoir $\lambda = \frac{h}{p}$ (formule de de Broglie : voir plus loin), ce qui entraîne (en remplaçant p par $m_e \cdot v$) :

$$2 \cdot \pi \cdot r = n \cdot \lambda = \frac{n \cdot h}{p} = \frac{n \cdot h}{m_e \cdot v} ;$$

$$v = \frac{n \cdot h}{2 \cdot \pi \cdot r \cdot m_e} = \frac{n \cdot \hbar}{r \cdot m_e}.$$

Rappelons que $\frac{h}{2 \cdot \pi} = \hbar$.

$$v^2 = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{r^2 \cdot m_e^2} = K \cdot \frac{e^2}{m_e \cdot r} ;$$

$$n^2 \cdot \hbar^2 = K \cdot e^2 \cdot m_e \cdot r ;$$

$$r = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{K \cdot e^2 \cdot m_e} ;$$

$$v^2 = K \cdot \frac{e^2}{m_e \cdot r} = K \cdot \frac{e^2}{m_e} \cdot \frac{K \cdot e^2 \cdot m_e}{n^2 \cdot \hbar^2} = \frac{K^2 \cdot e^4}{n^2 \cdot \hbar^2} .$$

Calculons l'énergie cinétique et l'énergie potentielle de l'électron :

$$E_c = \frac{m_e \cdot v^2}{2} = \frac{m_e \cdot K^2 \cdot e^4}{2 \cdot n^2 \cdot \hbar^2} ;$$

$$E_p = \int_{\infty}^r F \cdot dr = \int_{\infty}^r K \cdot \frac{e^2}{r^2} = -K \cdot e^2 \cdot \left[\frac{1}{r} \right]_{\infty}^r = -\frac{K \cdot e^2}{r} ;$$

$$E_p = -\frac{K \cdot e^2}{r} = -K \cdot e^2 \cdot \frac{K \cdot e^2 \cdot m_e}{n^2 \cdot \hbar^2} = -\frac{m_e \cdot K^2 \cdot e^4}{n^2 \cdot \hbar^2} ;$$

$$E = E_c + E_p = -\frac{m_e \cdot K^2 \cdot e^4}{2 \cdot n^2 \cdot \hbar^2} .$$

Nous voyons donc que les niveaux d'énergie de l'électron sont quantifiés; le nombre quantique (dit "principal") est n .

Ce nombre quantique principal est donc défini par : $n = \frac{2 \cdot \pi \cdot r}{\lambda}$, et l'énergie d'un électron est proportionnelle à $-\frac{1}{n^2}$; quand un électron saute du niveau n au niveau $n + 1$, par exemple, le gain d'énergie est proportionnel à : $-\frac{1}{(n+1)^2} + \frac{1}{n^2} = \frac{-n^2 + (n+1)^2}{n^2 \cdot (n+1)^2} = \frac{2 \cdot n + 1}{n^2 \cdot (n+1)^2}$.

Malgré ses approximations (on a supposé que $p = m_e \cdot v$, que $E_c = \frac{m_e \cdot v^2}{2}$, formules non relativistes; de plus, on a choisi arbitrairement une orbite circulaire), ce modèle simpliste permet de retrouver la loi de Rydberg avec une bonne approximation, ce qui fait penser qu'on est sur la bonne voie... En tout cas, l'hypothèse d'un électron qui serait non pas un corpuscule mais une onde stationnaire avec la longueur d'onde prévue par de Broglie s'en trouve confortée.

Un point capital est que l'électron ne perd pas de l'énergie de manière continue, comme le prévoyait la théorie classique : tant qu'il reste sur une orbite stable, il n'y a ni gain ni perte d'énergie; c'est lorsqu'il saute d'une orbite à une autre qu'il y a un gain ou une perte d'énergie (un échange). Un tel saut (instantané?) correspond à une "catastrophe", un effondrement de la fonction d'onde, un collapse. C'est ce qui fait de l'atome de Bohr un modèle quantique.

Dans cette présentation, nous avons pris des libertés avec la chronologie, puisque nous avons utilisé la formule $\lambda = \frac{h}{p}$, qui est due à Louis de Broglie (1923) alors que le modèle de Bohr est déjà bien avancé en 1913. La formule de de Broglie est indispensable à une bonne compréhension de l'atome de Bohr, et le modèle de Bohr est l'une des bases du travail de de Broglie.

Une nouvelle avancée est due à Sommerfeld, qui, en envisageant des orbites elliptiques, retrouve par le calcul le second nombre quantique, qui est lié au moment angulaire orbital de l'électron.

Mais c'est surtout grâce à l'équation de Schrödinger (voir plus loin) qu'une percée décisive va être réalisée.

6 Louis de Broglie et la mécanique ondulatoire

Dans son interprétation de l'effet photoélectrique, Einstein présente les quanta de lumière (qu'on appelle aujourd'hui des photons) comme des corpuscules. Nous avons vu qu'il existe des raisons de douter de cette représentation. Mais il est certain que le rapprochement des travaux de Planck avec les mystères, alors non résolus, de l'effet photoélectrique, a fait jaillir la lumière !

Mais si la lumière, que les physiciens considéraient jusqu'alors comme un phénomène purement ondulatoire, possède des propriétés qu'on attribuait aux corpuscules, on peut se demander si les particules (électrons, protons par exemple) n'auraient pas des propriétés ondulatoires... Ce serait un pas en avant dans l'unification de la nature ! Et ce serait aussi un apport majeur à la théorie de Bohr.

Sachant que l'énergie cinétique E et l'impulsion p d'un photon sont liées à sa fréquence ν par les formules $E = h.\nu$ et $p = \frac{h.\nu}{c}$, sachant de plus que $\nu = \frac{1}{T}$ et que $c.T = \lambda$, on peut écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} E = \frac{h}{T} ; \\ p = \frac{h}{\lambda} . \end{array} \right.$$

Ou encore :

$$\left\{ \begin{array}{l} T = \frac{h}{E} ; \\ \lambda = \frac{h}{p} . \end{array} \right.$$

Sous cette forme, ces égalités font bien apparaître la symétrie qui existe entre, d'une part, l'énergie et l'impulsion (composantes du quadrivecteur énergie-impulsion, dont le rôle est fondamental en relativité restreinte), et, d'autre part, λ et T , donc l'espace et le temps (composantes du quadrivecteur d'espace-temps, tout aussi fondamental). Il est donc très tentant de généraliser ces formules à toutes les particules, de masse au repos nulle ou non.

En 1923–24, Louis de Broglie a organisé ces idées en un ensemble si cohérent qu'Einstein a été séduit, et a fait publier ces travaux en Allemagne.

La première formule : $E = \frac{h}{T} = h.\nu$, est exactement celle qui résulte des travaux de Planck et d'Einstein, mais généralisée aux particules de masse au repos non nulle. La seconde : $\lambda = \frac{h}{p}$, est plus originale ; elle constitue l'apport le plus novateur du travail de Louis de Broglie.

C'est cette seconde formule qui va être confirmée par Bohr, à travers son modèle de l'atome d'hydrogène.

Mais elle va également être confirmée, après le décès de Louis de Broglie, par la mise en évidence de la diffraction des électrons. Ces expériences vont montrer que l'électron possède bien une nature ondulatoire, avec, précisément, la longueur d'onde prévue par Louis de Broglie.

7 La fonction d'onde de Schrödinger

Dans le document sur la Physique quantique (généralités), nous avons évoqué la "Fonction canonique de communication immédiate", ou fonction d'onde progressive monochromatique :

$$f(\vec{r}, t) = f(\vec{0}, 0).e^{i.(\vec{k}.\vec{r}-\omega.t)}.$$

On peut considérer qu'il s'agit d'une fonction d'onde élémentaire, associée à un photon unique, ou à tout autre particule de masse au repos nulle et de vitesse égale à c .

Sa généralisation sera plus évidente si on l'écrit ainsi :

$$f(\vec{r}, t) = f(\vec{0}, 0).e^{\frac{i}{\hbar}.\vec{p}.\vec{r}-E.t}.$$

L'usage est d'employer la lettre Ψ pour désigner les fonctions d'onde. On écrira :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{0}, 0).e^{\frac{i}{\hbar}.\vec{p}.\vec{r}-E.t}.$$

Par projection sur la direction du déplacement, on obtient :

$$\Psi(r, t) = \Psi(0, 0).e^{\frac{i}{\hbar}.(p.r-E.t)}.$$

Considérons maintenant une particule de masse au repos non nulle et de vitesse inférieure à c , par exemple un électron. Cette formule ne s'applique pas dans ce cas. Cependant, il y a des raisons de penser que toute particule de masse au repos non nulle est équivalente à un ensemble de particules de masses au repos nulles et de vitesses toutes égales à c , mais non colinéaires. Cette idée sera développée dans le document "Champ d'entraînement", paragraphe sur la "Notion de masse en relativité restreinte".

Nous admettrons donc que la fonction d'onde d'un électron (ou de toute autre particule de masse au repos non nulle) est égale à la somme d'un nombre indéterminé de fonctions d'onde élémentaires.

Or il se trouve qu'en différenciant l'équation d'onde élémentaire par rapport à t et à r , on obtient des relations simples, qui devraient être valables aussi pour l'électron, en raison de la linéarité des opérateurs différentiels :

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = \Psi(0, 0) \cdot \frac{\partial}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar} \cdot (p \cdot r - E \cdot t)} = -\frac{i \cdot E}{\hbar} \cdot \Psi(0, 0) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \cdot (p \cdot r - E \cdot t)} = -\frac{i \cdot E}{\hbar} \cdot \Psi(r, t) ;$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \Psi(r, t) = \Psi(0, 0) \cdot \frac{\partial}{\partial r} e^{\frac{i}{\hbar} \cdot (p \cdot r - E \cdot t)} = \frac{i \cdot p}{\hbar} \cdot \Psi(0, 0) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \cdot (p \cdot r - E \cdot t)} = \frac{i \cdot p}{\hbar} \cdot \Psi(r, t).$$

La seconde relation ne concerne que la direction du déplacement ; si on rétablit les deux autres directions spatiales, on obtient :

$$\vec{\nabla} \Psi(r, t) = \frac{i \cdot \vec{p}}{\hbar} \cdot \Psi(r, t),$$

où $\vec{\nabla}$ représente le gradient. On a donc :

$$\begin{cases} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i \cdot E}{\hbar} \cdot \Psi ; \\ \vec{\nabla} \Psi = \frac{i \cdot \vec{p}}{\hbar} \cdot \Psi ; \\ E \cdot \Psi = i \cdot \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} ; \\ \vec{p} \cdot \Psi = -i \cdot \hbar \cdot \vec{\nabla} \Psi. \end{cases}$$

Conformément aux idées de Heisenberg, on considère que E et p ne doivent pas être conçus comme des quantités définies de manière univoque, mais plutôt comme des opérateurs qui, appliqués à la fonction d'onde, renvoient un résultat (le résultat de la "mesure", ou de l'interaction) qui n'est pas parfaitement prévisible.

En notant \hat{E} et \hat{p} ces opérateurs, on écrira :

$$\begin{cases} \hat{E} = i \cdot \hbar \frac{\partial}{\partial t} ; \\ \hat{p} = -i \cdot \hbar \cdot \vec{\nabla}. \end{cases}$$

Venons-en à l'équation de Schrödinger, du moins sous sa forme primitive (1925), non relativiste (mais elle est suffisamment intéressante pour mériter notre attention).

En mécanique newtonienne classique, non relativiste, on a, pour une particule de masse au repos m non nulle, de vitesse v , d'énergie cinétique E_c et

d'impulsion $p : p = m.v$ et $E_c = \frac{1}{2}.m.v^2$, donc $E_c = \frac{p^2}{2.m}$. Pour obtenir l'énergie totale de la particule, il faut ajouter l'énergie potentielle V :

$$E = E_c + V = \frac{p^2}{2.m} + V.$$

Dans le présent contexte, cette égalité devient :

$$\hat{E} = \frac{\hat{p}^2}{2.m} + V = \frac{(-i.\hbar.\vec{\nabla})^2}{2.m} + V = -\frac{\hbar^2.\vec{\nabla}^2}{2.m} + V.$$

En termes d'opérateurs, le carré du gradient est égal au laplacien : $\vec{\nabla}^2 = \Delta$.

D'autre part, on a l'habitude de noter $\hat{H} = -\frac{\hbar^2.\Delta}{2.m} + V$ (opérateur hamiltonien). L'équation de Schrödinger non relativiste pourra donc s'écrire, sous sa forme indépendante du temps :

$$\hat{E}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2.\Delta}{2.m} + V \right) \Psi = \hat{H}\Psi.$$

Et sous forme dépendante du temps :

$$i.\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2.\Delta}{2.m} + V \right) \Psi.$$

Examinons plus particulièrement la forme indépendante du temps (équation stationnaire) dans le cas où l'énergie E est supposée fixée, et parfaitement connue sans ambiguïté. Elle s'écrit :

$$\left(-\frac{\hbar^2.\Delta}{2.m} + V \right) \Psi = E.\Psi ;$$

$$\frac{\hbar^2.\Delta\Psi}{2.m} = (V - E).\Psi.$$

Pour simplifier, nous allons considérer une seule dimension spatiale. Nous supposons que Ψ est une fonction de x seulement. L'équation devient :

$$\frac{\hbar^2}{2.m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = (V - E).\Psi(x) ;$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = \frac{2.m.(V - E)}{\hbar^2} \cdot \Psi(x).$$

Résolvons l'équation ci-dessus dans trois cas :

1) $V - E > 0$ (donc $V > E$) :

Posons : $\frac{2.m.(V-E)}{\hbar^2} = K^2$, donc $K = \frac{\sqrt{2.m.(V-E)}}{\hbar}$. Une équation de la forme : $\Psi''(x) = K^2.\Psi(x)$ a deux solutions triviales : $\Psi_1(x) = e^{K.x}$ et $\Psi_2(x) = e^{-K.x}$;

la solution générale est une combinaison linéaire (à coefficients complexes) de ces deux solutions triviales :

$$\Psi(x) = A.e^{K.x} + B.e^{-K.x}.$$

2) $V - E < 0$ (donc $V < E$) :

Posons : $\frac{2.m.(E-V)}{\hbar^2} = k^2$, donc $k = \frac{\sqrt{2.m.(E-V)}}{\hbar}$. Une équation de la forme : $\Psi''(x) = -k^2.\Psi(x)$ a deux solutions triviales : $\Psi_1(x) = e^{i.k.x}$ et $\Psi_2(x) = e^{-i.k.x}$; la solution générale est une combinaison linéaire de ces deux solutions triviales :

$$\Psi(x) = A.e^{i.k.x} + B.e^{-i.k.x}.$$

Le nombre k correspond au vecteur d'onde. Si $k > 0$, on a $\Psi(x) = A.e^{i.k.x}$, et l'onde est dirigée dans le sens des x croissants ; si $k < 0$, on a $\Psi(x) = B.e^{-i.k.x}$, et l'onde est dirigée dans le sens des x décroissants. On pourrait dire que la fonction d'onde générale est une superposition de fonctions d'ondes partielles.

Cas particulier : si $V = 0$, on a $k = \frac{\sqrt{2.m.E}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar}$ (car $E = \frac{p^2}{2.m}$). On a donc :

$$\Psi(x) = A.e^{\frac{i}{\hbar}.p.x} + B.e^{-\frac{i}{\hbar}.p.x}.$$

Nous avons introduit la fonction d'onde de Schrödinger en dérivant l'équation de l'onde progressive monochromatique : $\Psi(r, t) = \Psi(0, 0).e^{\frac{i}{\hbar}.(p.r - E.t)}$, qu'on peut écrire, sous sa forme indépendante du temps : $\Psi(x) = \Psi(0).e^{\frac{i}{\hbar}.p.x}$. Comme nous venons de faire ici une intégration, nous ne pouvons pas nous étonner de retrouver cette même fonction progressive monochromatique. Mais que vient faire ici le second terme : $B.e^{-\frac{i}{\hbar}.p.x}$? Il signifie que le problème tel que nous l'avons posé fixe la valeur de E , donc celle de $|p|$, mais ne fixe pas le sens de parcours : p peut être positif ou négatif. Nous avons donc deux solutions élémentaires. Par linéarité, chacune d'elles peut être affectée d'un coefficient réel quelconque. D'autre part, la phase de ces deux ondes n'est pas fixée ; mais A et B peuvent être considérés comme des nombres complexes, qu'on peut écrire ainsi : $A = ||A||.e^{\theta_1}$ et $B = ||B||.e^{\theta_2}$; en jouant sur θ_1 et θ_2 , on peut obtenir pour les deux ondes tous les déphasages possibles. On doit donc comprendre que l'équation de Schrödinger résume l'ensemble des solutions d'une même équation différentielle. Cet ensemble de solutions peut être considéré comme une "superposition de solutions".

3) $V - E = 0$ (donc $V = E$) :

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = 0.$$

Si une équation est de la forme $\Psi''(x) = 0$, alors $\Psi'(x) = K_1$ et $\Psi(x) = K_1.x + K_2$.

Dans les cas 1 et 3, contrairement au cas 2, les solutions ressemblent peu à l'équation de l'onde progressive monochromatique ; il faudrait utiliser l'analyse

de Fourier pour faire apparaître leur parenté.

Encore une remarque : les "solutions superposées" exprimées par une fonction d'onde correspondent-elles à des "états superposés"? C'est possible, mais pas certain. Il peut arriver que le problème n'ait pas été posé correctement, et fasse apparaître de fausses solutions.

Nous avons parlé des "Superpositions d'états" dans le document "Physique quantique : généralités". Nous avons pris l'exemple des atomes de Rydberg étudiés par Serge Haroche : il est possible de placer ces atomes dans un état superposé; les deux états existent bien simultanément, puisqu'ils produisent des interférences. C'est une réalité objective. C'est une vraie superposition d'états. Mais lorsque nous disons : "Dans le cas où $V = 0$, la fonction d'onde de Schrödinger s'écrit : $\Psi(x) = A.e^{\frac{i}{\hbar} \cdot p \cdot x} + B.e^{-\frac{i}{\hbar} \cdot p \cdot x}$ ", nous introduisons une fausse superposition d'états. Effectivement, nous introduisons des solutions à $p > 0$ et d'autres à $p < 0$, parce-que les données de notre problème ne nous disent pas si l'électron se déplace de gauche à droite ou de droite à gauche; ceci ne veut pas dire qu'il se déplace à la fois dans les deux sens! S'il se déplace de gauche à droite, il faut écrire : $\Psi(x) = A.e^{\frac{i}{\hbar} \cdot p \cdot x}$. De plus, si nous savons qu'il s'agit d'un électron unique, il faut choisir : $\|A\| = 1$, donc $A = \|A\|. \cos\theta = \cos\theta$. Il faudrait connaître la phase de l'onde pour fixer θ . Il s'agit d'une fausse superposition d'états, résultant seulement d'un manque d'information.

La fonction d'onde de Schrödinger joue un rôle fondamental en physique quantique. Mais comment faut-il l'interpréter?

Si on considère par exemple l'électron d'un atome d'hydrogène, sa fonction d'onde ne nous permet pas de savoir en quel point il se trouve à un instant donné. Ce qui est bien normal, puisque l'électron est considéré ici comme une onde et non comme un corpuscule. Pourtant, nous savons que l'électron, dans certaines circonstances, peut avoir un comportement qui fait bien penser à celui d'un corpuscule. Par exemple, il est sensible aux chocs : voir par exemple l'effet Compton, qui peut être décrit sur le modèle des boules de billard qui s'entrechoquent. Pour ménager la chèvre et le chou, Max Born a eu l'idée d'interpréter la fonction d'onde en termes probabilistes : le carré de la norme de Ψ donne la probabilité de trouver le corpuscule en un point donné. La fonction d'onde correspond à une "amplitude de probabilité de présence". Nous verrons sur un exemple (l'effet tunnel) une confirmation de ce point de vue.

Pour Max Born et pour les physiciens de l'"école de Copenhague", les notions d'onde et de corpuscule peuvent être conservées simultanément; mais un corpuscule est souvent dans une superposition d'états. Toute mesure, ou toute interaction, effectue un tri parmi les possibles, et la fonction d'onde s'en trouve remaniée. Le rôle des opérateurs introduits par Heisenberg est de mimer l'acte de mesure (ou le phénomène d'interaction), en faisant une sélection parmi les possibles.

Pour formaliser cette façon de voir, on considère que chaque mesure effectuée par l'observateur, ou chaque interaction, peut être représentée par un opérateur mathématique agissant sur la fonction d'onde. Le résultat de la mesure ne peut pas être prévu de manière certaine ; il ne peut être estimé que de manière statistique. Une fois connu, ce résultat sélectionne les avatars qui lui correspondent, et les autres vont à la corbeille. La fonction d'onde est réévaluée : c'est le collapse.

Il est donc tout à fait essentiel de comprendre que la fonction d'onde est du domaine du virtuel. Elle n'est pas traçable, en ce sens que, dès qu'on cherche à l'observer, elle s'évanouit. Elle est "évanescence". Peut-on baser une science sur une notion aussi fuyante ? La réponse est : oui. En tout cas, on peut essayer. Comment faire autrement ?

C'est Werner Heisenberg qui a poussé le plus loin le nouveau formalisme basé sur les opérateurs et les algèbres de matrices. Pour lui, le monde était discontinu, et l'équation de Schrödinger était trop continue pour coller à la réalité la plus profonde. C'est Paul Dirac qui a opéré le rapprochement des deux points de vue : celui de Schrödinger et celui de Heisenberg, et qui a montré qu'ils conduisent, par des chemins différents, à des conclusions cohérentes.

Mais pour Heisenberg le recours aux probabilités était incontournable : l'incertitude n'était pas seulement due à un manque d'information, mais elle était inhérente à la nature du monde. Niels Bohr a été lui aussi un redoutable théoricien de cette interprétation (celle de l'"école de Copenhague"), devenue ensuite dominante. Certains physiciens, dont Schrödinger lui-même, De Broglie, et bien sûr Einstein, ont été très peu enthousiasmés par cette interprétation. On connaît la parabole du chat de Schrödinger, qui est une parodie du point de vue dominant, et le "Dieu ne joue pas aux dés" d'Einstein.

Pour l'école de Copenhague, toute fonction d'onde est une superposition d'ondes élémentaires. Un photon correspond à une onde progressive élémentaire monochromatique unique : son impulsion est parfaitement déterminée, mais sa localisation est totalement indéterminée, car l'onde est uniformément répartie dans l'espace entier. A l'opposé, une particule peut avoir une position mieux déterminée, si sa fonction d'onde présente un pic de probabilité en un lieu précis ; il faut alors qu'elle soit la somme d'un grand nombre d'ondes élémentaires, selon la théorie de Fourier, pour que cette particularité se réalise. Mais alors il y a un grand nombre d'impulsions possibles.

On définit un principe de correspondance entre les grandeurs de la physique classique et les opérateurs quantiques, de la façon suivante :

		Mécanique classique	Mécanique quantique
1)	Longueurs	X	$\hat{X} = X$
2)	Impulsion	P	$\hat{P} = -i\hbar.\vec{\nabla}$
3)	Impulsion (composante)	P_X	$\hat{P}_X = -i\hbar.\frac{\partial}{\partial X}$
4)	Energie (non stationnaire)	E	$\hat{E} = i\hbar.\frac{\partial}{\partial t}$
5)	Hamiltonien (stationnaire)	$H = \frac{p^2}{2.m} + V = E$	$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2.m} + V = E$

On peut remarquer que les opérateurs ne commutent pas toujours. Par exemple, $\hat{X}o\hat{P}_X \neq \hat{P}_Xo\hat{X}$. Ceci signifie que la position et l'impulsion ne sont pas deux propriétés bien définies de la particule, préexistant à la mesure, et indépendantes entre elles. Le fait de mesurer l'une de ces deux quantités oblige la particule à faire un choix, parmi une infinité de choix possibles. L'autre quantité s'en trouve affectée. Mais précisons le calcul :

$$\hat{X}o\hat{P}_X(\Psi) = \hat{X} \left[-i\hbar.\frac{\partial\Psi}{\partial X} \right] = -i\hbar.X.\frac{\partial\Psi}{\partial X} ;$$

$$\hat{P}_Xo\hat{X}(\Psi) = -i\hbar.\frac{\partial(X.\Psi)}{\partial X} = -i\hbar. \left[\Psi + X.\frac{\partial\Psi}{\partial X} \right] = -i\hbar.X.\frac{\partial\Psi}{\partial X} - i\hbar.\Psi.$$

On a donc :

$$\hat{X}o\hat{P}_X(\Psi) - \hat{P}_Xo\hat{X}(\Psi) = i\hbar.\Psi \neq 0 ;$$

ou, en termes d'opérateurs :

$$\hat{X}o\hat{P}_X - \hat{P}_Xo\hat{X} = i\hbar.\hat{I}d.$$

L'opérateur ainsi obtenu est appelé : commutateur de \hat{X} et \hat{P}_X . On le note :

$$[\hat{X}, \hat{P}_X] = \hat{X}o\hat{P}_X - \hat{P}_Xo\hat{X} = i\hbar.\hat{I}d.$$

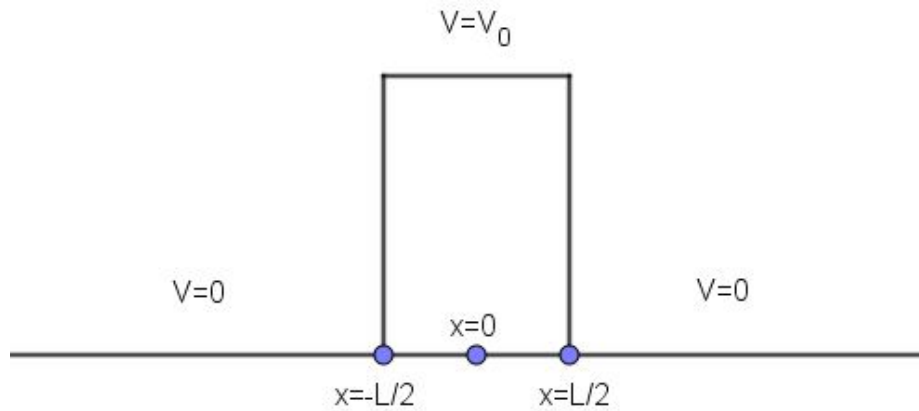
Selon la fonction d'onde de Schrödinger (interprétée par Born), la position et l'impulsion d'une particule ne sont définies que de manière probabiliste ; mais en plus, si on veut les mesurer, les résultats des deux mesures vont dépendre de l'ordre dans lequel elles ont été effectuées.

8 L'effet tunnel

Nous ne prendrons pas en compte les coordonnées spatiales y et z , ni le temps. Les ondes seront donc supposées stationnaires.

Dans la figure qui suit, l'axe horizontal est l'axe des x ; sur l'axe vertical, nous reportons le potentiel V .

Pour se fixer les idées, on pourra supposer qu'on parle d'un électron se déplaçant selon l'axe des x . Pour $x < -\frac{L}{2}$, le potentiel est nul ($V = 0$); de même pour $x > \frac{L}{2}$. Entre ces deux points ($-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$), le potentiel est égal à V_0 ($V_0 > 0$). Ce potentiel peut être créé grâce à des champs électriques. Lorsqu'un électron venant de la gauche arrive au point $x = -\frac{L}{2}$, il se heurte à une barrière de potentiel (un champ électrique contraire le freine). Selon la mécanique classique, il doit avoir une énergie cinétique supérieure à V_0 ($E > V_0$) pour "franchir la marche". Si son énergie cinétique est suffisante, il va continuer son chemin et, au point $x = \frac{L}{2}$, un champ électrique favorable va lui restituer son énergie initiale. Si son énergie est insuffisante ($E < V_0$) pour franchir la marche, il va être réfléchi par la barrière de potentiel.



Etudions ce problème à l'aide de la fonction d'onde de Schrödinger.

Distinguons trois domaines :

1) Domaine 1 : $x < -\frac{L}{2}$.

D'après ce qui précède, la fonction d'onde peut s'écrire :

$$\Psi_1(x) = A_1.e^{i.k.x} + B_1.e^{-i.k.x}.$$

En dérivant par rapport à x , on obtient :

$$\Psi_1'(x) = i.k.A_1.e^{i.k.x} - i.k.B_1.e^{-i.k.x}.$$

Puisque $V = 0$, on a : $k = \frac{\sqrt{2.m.E}}{\hbar}$.

2) Domaine 2 : $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$.

Nous allons supposer que $E < V_0$ (énergie cinétique insuffisante pour franchir la marche, selon la mécanique classique).

D'après ce qui précède, la fonction d'onde, dans ce domaine 2, peut s'écrire :

$$\Psi_2(x) = A_2.e^{K.x} + B_2.e^{-K.x}.$$

En dérivant par rapport à x , on obtient :

$$\Psi_2'(x) = K.A_2.e^{K.x} - K.B_2.e^{-K.x}.$$

De plus, on a vu que $K = \frac{\sqrt{2.m.(V_0-E)}}{\hbar}$.

3) Domaine 3 : $x > \frac{L}{2}$.

On peut reprendre ce qui a été dit pour le domaine 1 (avec la même valeur de k) :

$$\Psi_3(x) = A_3.e^{i.k.x} + B_3.e^{-i.k.x} ;$$

$$\Psi_3'(x) = i.k.A_3.e^{i.k.x} - i.k.B_3.e^{-i.k.x}.$$

Nous souhaitons assurer la continuité de la fonction Ψ et de sa dérivée Ψ' aux points $x = -\frac{L}{2}$ et $x = \frac{L}{2}$.

Commençons par $x = \frac{L}{2}$. On doit avoir $\Psi_2(\frac{L}{2}) = \Psi_3(\frac{L}{2})$ et $\Psi_2'(\frac{L}{2}) = \Psi_3'(\frac{L}{2})$, donc :

$$\begin{cases} A_2.e^{\frac{K.L}{2}} + B_2.e^{-\frac{K.L}{2}} = A_3.e^{\frac{i.k.L}{2}} + B_3.e^{-\frac{i.k.L}{2}} ; \\ K.A_2.e^{\frac{K.L}{2}} - K.B_2.e^{-\frac{K.L}{2}} = i.k.A_3.e^{\frac{i.k.L}{2}} - i.k.B_3.e^{-\frac{i.k.L}{2}}. \end{cases}$$

Divisons cette dernière équation par K ; remarquons que :

$$\frac{k}{K} = \frac{\sqrt{2.m.E}}{\hbar} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2.m.(V_0-E)}} = \frac{\sqrt{2.m.E}}{\sqrt{2.m.(V_0-E)}} = \sqrt{\frac{E}{V_0-E}}.$$

On obtient :

$$\begin{cases} A_2.e^{\frac{K.L}{2}} + B_2.e^{-\frac{K.L}{2}} = A_3.e^{\frac{i.k.L}{2}} + B_3.e^{-\frac{i.k.L}{2}} ; \\ A_2.e^{\frac{K.L}{2}} - B_2.e^{-\frac{K.L}{2}} = i.\sqrt{\frac{E}{V_0-E}} \cdot (A_3.e^{\frac{i.k.L}{2}} - B_3.e^{-\frac{i.k.L}{2}}). \end{cases}$$

Nous allons additionner, puis soustraire, ces deux égalités membre à membre. Il vient :

$$\begin{cases} 2.A_2.e^{\frac{K.L}{2}} = \left(1 + i.\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}\right).A_3.e^{\frac{i.k.L}{2}} + \left(1 - i.\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}\right).B_3.e^{-\frac{i.k.L}{2}} ; \\ 2.B_2.e^{-\frac{K.L}{2}} = \left(1 - i.\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}\right).A_3.e^{\frac{i.k.L}{2}} + \left(1 + i.\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}\right).B_3.e^{-\frac{i.k.L}{2}} . \end{cases}$$

On peut remarquer que :

$$1 + i.\sqrt{\frac{E}{V_0-E}} = \sqrt{\frac{V_0}{V_0-E}} \cdot \left(\sqrt{\frac{V_0-E}{V_0}} + i.\sqrt{\frac{E}{V_0}} \right).$$

Posons $\phi = 2.Arc\cos\sqrt{\frac{V_0-E}{V_0}}$; on a alors :

$$\cos\frac{\phi}{2} = \sqrt{\frac{V_0-E}{V_0}} \text{ et } \sin\frac{\phi}{2} = \sqrt{1 - \frac{V_0-E}{V_0}} = \sqrt{\frac{E}{V_0}}, \text{ donc :}$$

$$\sqrt{\frac{V_0-E}{V_0}} + i.\sqrt{\frac{E}{V_0}} = e^{\frac{i.\phi}{2}} \text{ et } \sqrt{\frac{V_0-E}{V_0}} - i.\sqrt{\frac{E}{V_0}} = e^{-\frac{i.\phi}{2}} ;$$

$$1 + i.\sqrt{\frac{E}{V_0-E}} = \sqrt{\frac{V_0}{V_0-E}}.e^{\frac{i.\phi}{2}} \text{ et } 1 - i.\sqrt{\frac{E}{V_0-E}} = \sqrt{\frac{V_0}{V_0-E}}.e^{-\frac{i.\phi}{2}}.$$

$$\begin{cases} A_2 = \frac{1}{2}.\sqrt{\frac{V_0}{V_0-E}}.e^{-\frac{K.L}{2}} \cdot \left(A_3.e^{\frac{i.k.L}{2}}.e^{\frac{i.\phi}{2}} + B_3.e^{-\frac{i.k.L}{2}}.e^{-\frac{i.\phi}{2}} \right) ; \\ B_2 = \frac{1}{2}.\sqrt{\frac{V_0}{V_0-E}}.e^{\frac{K.L}{2}} \cdot \left(A_3.e^{\frac{i.k.L}{2}}.e^{-\frac{i.\phi}{2}} + B_3.e^{-\frac{i.k.L}{2}}.e^{\frac{i.\phi}{2}} \right) ; \\ A_2 = \frac{1}{2}.\sqrt{\frac{V_0}{V_0-E}}.e^{-\frac{K.L}{2}} \cdot \left(A_3.e^{\frac{i.(k.L+\phi)}{2}} + B_3.e^{\frac{i.(-k.L-\phi)}{2}} \right) ; \\ B_2 = \frac{1}{2}.\sqrt{\frac{V_0}{V_0-E}}.e^{\frac{K.L}{2}} \cdot \left(A_3.e^{\frac{i.(k.L-\phi)}{2}} + B_3.e^{\frac{i.(-k.L+\phi)}{2}} \right). \end{cases}$$

Passons maintenant à $x = -\frac{L}{2}$. On doit avoir $\Psi_2(-\frac{L}{2}) = \Psi_1(-\frac{L}{2})$ et $\Psi_2'(-\frac{L}{2}) = \Psi_1'(-\frac{L}{2})$; il suffit de reprendre le calcul précédent, en remplaçant A_3 par A_1 , B_3 par B_1 , et L par $-L$. On obtient :

$$\begin{cases} A_2 = \frac{1}{2}.\sqrt{\frac{V_0}{V_0-E}}.e^{\frac{K.L}{2}} \cdot \left(A_1.e^{\frac{i.(-k.L+\phi)}{2}} + B_1.e^{\frac{i.(k.L-\phi)}{2}} \right) ; \\ B_2 = \frac{1}{2}.\sqrt{\frac{V_0}{V_0-E}}.e^{-\frac{K.L}{2}} \cdot \left(A_1.e^{\frac{i.(-k.L-\phi)}{2}} + B_1.e^{\frac{i.(k.L+\phi)}{2}} \right). \end{cases}$$

En rapprochant les deux expressions obtenues pour A_2 , puis les deux expressions obtenues pour B_2 , nous allons pouvoir maintenant éliminer A_2 et B_2 :

$$\begin{cases} e^{-\frac{K.L}{2}} \cdot \left(A_3.e^{\frac{i.(k.L+\phi)}{2}} + B_3.e^{\frac{i.(-k.L-\phi)}{2}} \right) = e^{\frac{K.L}{2}} \cdot \left(A_1.e^{\frac{i.(-k.L+\phi)}{2}} + B_1.e^{\frac{i.(k.L-\phi)}{2}} \right) ; \\ e^{\frac{K.L}{2}} \cdot \left(A_3.e^{\frac{i.(k.L-\phi)}{2}} + B_3.e^{\frac{i.(-k.L+\phi)}{2}} \right) = e^{-\frac{K.L}{2}} \cdot \left(A_1.e^{\frac{i.(-k.L-\phi)}{2}} + B_1.e^{\frac{i.(k.L+\phi)}{2}} \right). \end{cases}$$

Jusqu'ici, nous avons respecté scrupuleusement la symétrie du problème : l'électron pouvait se déplacer aussi bien de gauche à droite que de droite à gauche. Nous allons maintenant casser cette symétrie : nous choisissons d'étudier un électron se déplaçant de gauche à droite. Les coefficients A_1 et B_1 déterminent l'amplitude de deux ondes définies dans le domaine 1 : le premier (A_1) correspond à l'onde incidente, le second (B_1) à une onde réfléchie. Dans le domaine 3, A_3 correspond à l'onde transmise. On doit avoir $B_3 = 0$, car dans cette hypothèse il n'y a pas d'onde incidente provenant du domaine 3 et se déplaçant dans le sens des x décroissants.

$$\begin{cases} e^{-\frac{K.L}{2}}.A_3.e^{\frac{i.(k.L+\phi)}{2}} = e^{\frac{K.L}{2}}.(A_1.e^{\frac{i.(-k.L+\phi)}{2}} + B_1.e^{\frac{i.(k.L-\phi)}{2}}) ; \\ e^{\frac{K.L}{2}}.A_3.e^{\frac{i.(k.L-\phi)}{2}} = e^{-\frac{K.L}{2}}.(A_1.e^{\frac{i.(-k.L-\phi)}{2}} + B_1.e^{\frac{i.(k.L+\phi)}{2}}) ; \\ \begin{cases} e^{-K.L}.A_3 = e^{\frac{i.(-k.L-\phi)}{2}}.(A_1.e^{\frac{i.(-k.L+\phi)}{2}} + B_1.e^{\frac{i.(k.L-\phi)}{2}}) ; \\ e^{K.L}.A_3 = e^{\frac{i.(-k.L+\phi)}{2}}.(A_1.e^{\frac{i.(-k.L-\phi)}{2}} + B_1.e^{\frac{i.(k.L+\phi)}{2}}) ; \end{cases} \\ \begin{cases} e^{-K.L}.A_3 = A_1.e^{-i.k.L} + B_1.e^{-i.\phi} ; \\ e^{K.L}.A_3 = A_1.e^{-i.k.L} + B_1.e^{i.\phi} . \end{cases} \end{cases}$$

Par soustraction membre à membre, on obtient :

$$(e^{K.L} - e^{-K.L}).A_3 = (e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}).B_1 ;$$

$$B_1 = \frac{e^{K.L} - e^{-K.L}}{e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}}.A_3.$$

Reportons dans la première équation du système ci-dessus :

$$e^{-K.L}.A_3 = A_1.e^{-i.k.L} + \frac{e^{K.L} - e^{-K.L}}{e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}}.A_3.e^{-i.\phi} ;$$

$$\left(e^{-K.L} - \frac{e^{K.L} - e^{-K.L}}{e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}}.e^{-i.\phi} \right).A_3 = A_1.e^{-i.k.L} ;$$

$$\frac{e^{-K.L}.(e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}) - (e^{K.L} - e^{-K.L}).e^{-i.\phi}}{e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}}.A_3 = A_1.e^{-i.k.L} ;$$

$$\frac{e^{-K.L}.e^{i.\phi} - e^{K.L}.e^{-i.\phi}}{e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}}.A_3 = A_1.e^{-i.k.L} ;$$

$$A_3 = \frac{e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}}{e^{-K.L}.e^{i.\phi} - e^{K.L}.e^{-i.\phi}}.e^{-i.k.L}.A_1.$$

$$B_1 = \frac{e^{K.L} - e^{-K.L}}{e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}}.A_3 = \frac{e^{K.L} - e^{-K.L}}{e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}} \cdot \frac{e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}}{e^{-K.L}.e^{i.\phi} - e^{K.L}.e^{-i.\phi}}.e^{-i.k.L}.A_1 ;$$

$$B_1 = \frac{e^{K.L} - e^{-K.L}}{e^{-K.L}.e^{i.\phi} - e^{K.L}.e^{-i.\phi}}.e^{-i.k.L}.A_1.$$

Rappelons que B_1 correspond à l'onde réfléchie, et que A_3 correspond à l'onde transmise. Le résultat essentiel est celui-ci : l'amplitude de l'onde transmise ne s'annule pas, ce qui signifie (pour reprendre l'interprétation de Born) que la probabilité que l'électron traverse la barrière et continue son chemin de l'autre côté (dans le domaine 3) est non nulle. Dans ce cas, l'énergie E de l'électron n'est pas affectée.

Complétons ce calcul ; on peut faire plusieurs remarques concernant les modules des expressions ainsi obtenues. Nous allons poser :

$$\begin{cases} \alpha = e^{i.\phi} - e^{-i.\phi} ; \\ \beta = e^{K.L} - e^{-K.L} ; \\ \gamma = e^{-K.L}.e^{i.\phi} - e^{K.L}.e^{-i.\phi}. \end{cases}$$

On a alors :

$$A_3 = \frac{\alpha}{\gamma}.e^{-i.k.L}.A_1 \quad \text{et} \quad B_1 = \frac{\beta}{\gamma}.e^{-i.k.L}.A_1.$$

$$\|e^{-i.k.L}\|^2 = e^{-i.k.L}.e^{i.k.L} = e^0 = 1 ;$$

$$\alpha = e^{i.\phi} - e^{-i.\phi} = 2.i.\sin\phi = 4.i.\sin\frac{\phi}{2}.\cos\frac{\phi}{2} = 4.i.\sqrt{\frac{E}{V}}.\sqrt{\frac{V-E}{V}},$$

donc :

$$\|\alpha\|^2 = 16.\frac{E.(V-E)}{V^2}.$$

D'autre part :

$$\|\alpha\|^2 = \|e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}\|^2 = (e^{i.\phi} - e^{-i.\phi}).(e^{-i.\phi} - e^{i.\phi}) = -e^{2.i.\phi} - e^{-2.i.\phi} + 2 ;$$

$$\|\beta\|^2 = \|e^{K.L} - e^{-K.L}\|^2 = (e^{K.L} - e^{-K.L})^2 = e^{2.K.L} + e^{-2.K.L} - 2 ;$$

$$\|\alpha\|^2 + \|\beta\|^2 = e^{2.K.L} + e^{-2.K.L} - e^{2.i.\phi} - e^{-2.i.\phi} ;$$

$$\|\gamma\|^2 = \|e^{-K.L}.e^{i.\phi} - e^{K.L}.e^{-i.\phi}\|^2 = (e^{-K.L}.e^{i.\phi} - e^{K.L}.e^{-i.\phi}).(e^{-K.L}.e^{-i.\phi} - e^{K.L}.e^{i.\phi}) ;$$

$$\|\gamma\|^2 = e^{2.K.L} + e^{-2.K.L} - e^{2.i.\phi} - e^{-2.i.\phi} ;$$

$$\|\gamma\|^2 = \|\alpha\|^2 + \|\beta\|^2.$$

Reprenons les expressions de A_3 et B_1 en fonction de A_1 :

$$\|A_3\|^2 = \frac{\|\alpha\|^2}{\|\gamma\|^2}.\|A_1\|^2 = \frac{\|\alpha\|^2}{\|\alpha\|^2 + \|\beta\|^2}.\|A_1\|^2 ;$$

$$\|B_1\|^2 = \frac{\|\beta\|^2}{\|\gamma\|^2}.\|A_1\|^2 = \frac{\|\beta\|^2}{\|\alpha\|^2 + \|\beta\|^2}.\|A_1\|^2 ;$$

on a donc :

$$\|A_3\|^2 + \|B_1\|^2 = \|A_1\|^2.$$

Ceci illustre parfaitement l'idée de Max Born, selon laquelle le carré de l'amplitude de l'onde exprime une probabilité de présence de la particule. Ici, $\|A_1\|^2$ est la probabilité d'avoir un électron incident venant de la gauche et se déplaçant dans le sens des x croissants. On peut admettre que $\|A_1\|^2 = 1$, puisque c'est notre hypothèse de travail. D'autre part, $\|A_3\|^2$ est la probabilité que l'électron soit transmis (il franchit alors la barrière de potentiel sans être affecté), et $\|B_1\|^2$ est la probabilité qu'il soit réfléchi. Il est donc bien normal qu'on ait $\|A_3\|^2 + \|B_1\|^2 = 1$: cette égalité signifie simplement que l'électron se conserve ; s'il n'est pas transmis, il est réfléchi, et réciproquement. Si on raisonne sur un grand nombre d'électrons incidents, alors, en additionnant les électrons transmis et les électrons réfléchis, on retrouve le nombre d'électrons incidents. Ceci nous semble évident ; mais, mathématiquement, l'idée de Born (qui nous dit que la probabilité de présence est donnée par le carré de la norme de l'onde) est nécessaire pour que cette conservation soit assurée.

Cette façon de traiter l'effet tunnel à l'aide de la fonction d'onde est exemplaire. Elle montre clairement que le physicien qui travaille sur ce sujet se trouve face à deux types d'incertitudes. Le premier type est dû à un manque d'information : dans un premier temps, nous avons écrit la fonction d'onde sans tenir compte du nombre d'électrons injectés dans le dispositif, ni du sens de parcours, ni de la phase de l'onde. Nous avons obtenu des équations différentielles qui traduisent les données du problème tel que nous l'avons posé, donc les informations que nous avons bien voulu utiliser. Ces équations différentielles ne se situent pas vraiment au niveau purement physique, mais en partie au niveau informationnel. Nous avons ensuite élagué ces équations pour tenir compte du fait que nous raisonnons sur un électron unique se déplaçant de gauche à droite (informations qui résultent du dispositif expérimental). Nous obtenons alors des équations "propres", qui serrent au plus près le problème physique, sans qu'il soit pollué par le manque d'information.

Mais nous rencontrons ensuite une autre incertitude : l'électron va-t-il être réfléchi ou transmis ? Cette incertitude semble fondamentale, en ce sens que l'observateur ne peut pas répondre avant d'avoir effectué l'expérience, et la fonction d'onde de Schrödinger ne donne qu'une réponse probabiliste. La clé ne se trouve pas dans le dispositif expérimental, puisqu'avec un même dispositif l'électron peut être aussi bien réfléchi que transmis. Où se trouve-t-elle ? Personne ne le sait. Certains physiciens pensent que cette incertitude est irréductible, et que le déterminisme rigoureux atteint ici sa limite, et doit nécessairement passer le relais aux probabilités. D'autres pensent que la fonction d'onde ne décrit pas intégralement la réalité, et qu'on pourra peut-être un jour aller plus loin.

Il faut ajouter que l'effet tunnel est aujourd'hui un phénomène parfaitement bien établi expérimentalement. C'est à partir de ce principe qu'a été conçu le

microscope à effet tunnel. D'autres part, Georges Gamow a proposé une explication de la radioactivité basée sur ce même principe : par exemple, une particule α , composée de deux neutrons et de deux protons, peut s'échapper du noyau d'un atome, bien qu'elle soit en principe piégée dans un puits de potentiel. Quelle que soit la profondeur de ce puits, la probabilité de s'en libérer par effet tunnel n'est jamais nulle.

9 L'atome selon Schrödinger

Que nous apporte l'équation de Schrödinger au sujet de l'atome d'hydrogène ?

La première chose à faire est de remplacer V par l'énergie potentielle de l'électron, qui a été calculée dans le modèle de Bohr :

$$V = V(r) = E_p = -\frac{K.e^2}{r} = -\frac{1}{4.\pi.\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}.$$

On recherche une onde stationnaire (indépendante du temps). L'équation à résoudre est donc :

$$E.\Psi = \left(-\frac{\hbar^2.\Delta}{2.m} + V \right) \Psi = \left(-\frac{\hbar^2.\Delta}{2.m} - \frac{K.e^2}{r} \right) \Psi ;$$

$$\frac{\hbar^2}{2.m}.\Delta.\Psi = \left(-E - \frac{K.e^2}{r} \right) .\Psi.$$

Le symbole Δ représente ici l'opérateur laplacien, qui s'écrit, en coordonnées cartésiennes :

$$\Delta.\Psi = \nabla^2.\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}.$$

On se place ensuite dans un système de coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) pour s'adapter au mieux aux symétries supposées de la fonction d'onde. Le laplacien s'écrit alors :

$$\Delta.\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial\Psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cdot \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \cdot \frac{\partial^2\Psi}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \cdot \frac{\partial\Psi}{\partial \theta} \right) \right].$$

On l'insère dans l'équation ci-dessus. Nous ne retranscrivons pas ici la résolution, qui est particulièrement compliquée. Disons seulement qu'on sépare les variables en écrivant :

$$\Psi(r, \theta, \phi) = A(r).B(\theta).C(\phi).$$

La résolution de cette équation fait apparaître trois nombres entiers (les trois nombres quantiques), qu'on note l, m, n . Ceci peut paraître surprenant, étant

donné que l'équation elle-même ne contient que du continu. C'est le fait de chercher des solutions stationnaires qui conduit à la quantification.

Le nombre n (entier naturel non nul) est le nombre quantique principal, associé à l'énergie de l'électron, comme dans le modèle de Bohr.

Le nombre l (entier naturel compris entre 0 et $n-1$) est le nombre quantique azimutal, associé au moment angulaire orbital de l'électron, qui est quantifié : $J = \sqrt{l(l+1)}\hbar$.

Le nombre m (entier relatif compris entre $-l$ et l) est le nombre quantique magnétique ; il correspond à la composante de J selon l'axe Oz , qui est elle-même quantifiée : $J_z = m\hbar$.

A chaque combinaison des trois nombres quantiques correspond, non pas une orbite de l'électron, au sens classique (ou au sens de Bohr), mais une orbitale $\Psi_{l,m,n}(r, \theta, \phi)$. Selon l'interprétation de Max Born, cette fonction permet de définir, en chaque point de l'espace, la probabilité de présence de l'électron. D'autres physiciens préfèrent dire que cette fonction (cette onde stationnaire) est l'électron.

Nous voyons donc que l'équation de Schrödinger, qui au départ pouvait ressembler à un bricolage approximatif (elle n'est même pas relativiste!), nous permet de plonger très profondément dans l'univers quantique de l'atome d'hydrogène.

Les prédictions basées sur cette équation ont été magistralement confirmées ; toutes les observations semblaient s'expliquer, sauf une : l'effet Zeeman anormal.

C'est Paul Dirac qui s'est attelé à la tâche, et qui a réussi, en 1928, à rendre l'équation de Schrödinger relativiste, au prix d'un profond remaniement des concepts et du formalisme. Et le spin de l'électron est venu s'insérer tout naturellement dans son équation ! Ce qui a permis de comprendre l'effet Zeeman anormal, qui est lié au spin de l'électron (non pris en compte dans le modèle de Bohr, pas plus que dans l'équation de Schrödinger de base).

L'étude de l'atome d'hydrogène n'était qu'un galop d'essai ; les atomes plus complexes devaient suivre.

Dans l'étude des atomes possédant plusieurs électrons, la fonction d'onde de Schrödinger, même revue par Dirac, ne suffit plus : il faut encore admettre le principe d'exclusion de Pauli, selon lequel deux électrons d'un même atome ne peuvent en aucun cas avoir exactement les mêmes nombres quantiques. Ceci nous oblige à concevoir l'atome comme un tout formé de parties (le noyau, les orbitales électroniques) imbriquées d'une manière très particulière.

Tandis que Schrödinger travaillait sur son équation, et même un peu avant, Werner Heisenberg travaillait sur sa mécanique matricielle : son but était de formaliser et d'unifier les connaissances de physique quantique, de manière algébrique, à l'aide de matrices. Et les résultats étaient au rendez-vous... Mais entre les matrices de Heisenberg et la fonction d'onde de Schrödinger, que fallait-il choisir ? C'est encore Dirac qui a réussi à montrer que ces deux approches sont, d'une certaine manière, équivalentes. La fonction d'onde de Schrödinger a le défaut d'introduire du continu pour traiter le discontinu, mais elle est plus intuitive et plus facile à manipuler.

10 La théorie des lacunes

Comme nous l'avons dit, c'est Paul Dirac qui a réalisé l'exploit de rendre la fonction d'onde de Schrödinger relativiste, en introduisant cependant des matrices particulières : les spineurs.

Au cours de ce travail, il a remarqué que, dans ses équations, l'énergie pouvait avoir un signe aussi bien négatif que positif. Et il s'est donc posé la question : une particule peut-elle avoir une énergie négative ?

Comme il se trouvait alors au cœur d'une réflexion sur la théorie des champs, selon laquelle le vide quantique pourrait être modélisé comme une mer de particules virtuelles, il a suggéré que cette mer (la "mer de Dirac") pourrait contenir des bulles (les "lacunes"), ayant des propriétés inverses de celles des particules, et, surtout, une énergie négative. Le terme d'antiparticules a été forgé pour désigner ces lacunes. En 1931, Dirac suggéra l'existence possible de l'anti-électron.

Et il se trouve qu'en 1932, Carl David Anderson détecta dans une chambre à brouillard des traces qui semblaient lui correspondre. C'est Jean Thibaud, en 1933, qui parvient à préciser les propriétés de cette antiparticule, qu'on appelle aujourd'hui positron (positon en Français) : elle a la même masse que l'électron, le même spin ($1/2$), mais une charge électrique opposée.

Il s'agit d'un immense succès pour la théorie de Dirac... A un détail près : lorsqu'un électron et un positron se rencontrent, ils disparaissent en donnant naissance à des photons. On dit qu'ils s'annihilent, mais c'est un abus de langage, puisqu'un photon, ce n'est pas rien ! Si l'énergie du positron était négative, et celle de l'électron positive, elles s'annuleraient dans la collision. Mais ce n'est pas ce qu'on observe : l'énergie des photons émis est égale à la somme des énergies des deux particules, qui sont toutes les deux positives, et s'additionnent. Les antiparticules existent bien, mais elles n'ont pas une énergie négative ! La théorie des lacunes est donc tout simplement fautive, même si elle a mis les physiciens sur la piste du positron et de l'antimatière.

Ceci ne diminue en rien le génie de Dirac, mais illustre une fois de plus le rôle du hasard, et du tâtonnement, dans les grandes découvertes.

La théorie quantique des champs utilise toujours les diagrammes de Feynman, qui peuvent laisser penser que le vide est quand même une "mer de Dirac", peuplée d'une multitude de particules. Mais il faut bien se rappeler que ces particules sont purement virtuelles!

11 L'oscillateur harmonique et l'énergie du point zéro

L'oscillateur harmonique joue un grand rôle en physique quantique, comme en physique classique. Son étude à l'aide de la fonction d'onde de Schrödinger conduit à des conclusions à la fois très surprenantes et très profondes.

Voyons ceci de plus près. Notre calcul va commencer de manière très classique, pas même relativiste.

Comme oscillateur, choisissons une bille de masse m attachée à un ressort. Lorsqu'on éloigne la bille de sa position d'équilibre d'une distance x , elle subit une force de rappel proportionnelle à x : $F = -k.x$. On a alors, selon la mécanique newtonienne : $F = m.\frac{dv}{dt} = m.\frac{d^2x}{dt^2} = -kx$; on a donc :

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{k}{m}.x.$$

En posant : $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ (ce qui signifie que $k = m.\omega^2$), cette équation différentielle devient :

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2.x.$$

Ses solutions sont de la forme :

$$x = K.\sin(\omega.(t - t_0)).$$

La constante K dépend de l'élongation maximale du ressort.

On a alors :

$$v = \frac{dx}{dt} = K.\omega.\cos(\omega.(t - t_0)) ;$$
$$\gamma = \frac{dv}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2} = -K.\omega^2.\sin(\omega.(t - t_0)).$$

L'énergie potentielle s'obtient en intégrant le travail de la force :

$$E_p = \frac{1}{2}.k.x^2.$$

La formule de l'énergie cinétique est bien connue :

$$E_c = \frac{1}{2}.m.v^2.$$

L'énergie mécanique totale est donc :

$$E = E_p + E_c = \frac{1}{2}.k.x^2 + \frac{1}{2}.m.v^2 ;$$

$$E = \frac{1}{2}.k.K^2.\sin^2(\omega.(t - t_0)) + \frac{1}{2}.m.K^2.\omega^2.\cos^2(\omega.(t - t_0)).$$

Comme $k = m.\omega^2$, on obtient :

$$E = \frac{1}{2}.K^2.m.\omega^2.$$

Bien entendu, cette énergie est constante. Elle est directement reliée à la pulsation $\omega = \frac{2.\pi}{T} = 2.\pi.\nu$.

Posons : $p = m.v$ (impulsion, ou quantité de mouvement, de la bille). On peut remarquer que $E_c = \frac{1}{2}.m.v^2 = \frac{1}{2.m}.(m.v)^2 = \frac{1}{2}.\frac{p^2}{m}$. On peut donc écrire :

$$\frac{1}{2}.k.x^2 + \frac{1}{2}.\frac{p^2}{m} = E = c^{te} ;$$

$$k.x^2 + \frac{p^2}{m} = 2.E = c^{te}.$$

Puisque $k = m.\omega^2$, on peut écrire aussi :

$$E = \frac{1}{2}.\left(\frac{p^2}{m} + m.\omega^2.x^2\right).$$

Examinons maintenant le problème des oscillateurs quantiques, en utilisant la fonction d'onde de Schrödinger. Pour plus de simplicité, nous ne ferons intervenir qu'une dimension spatiale.

Nous allons imaginer, pour nous fixer les idées, un atome pris dans un réseau cristallin.

Les mouvements de cet atome dans le réseau sont limités par la présence des atomes voisins, qui exercent sur lui des forces d'origine électromagnétique. Si leurs positions étaient fixes, l'atome en question aurait une position d'équilibre parfaitement déterminée dans le réseau. Pour la déterminer, il serait possible d'exprimer les forces exercées par les atomes voisins en utilisant un potentiel V , et de chercher le point où ce potentiel est extrémal (et sa dérivée spatiale nulle).

Au voisinage de ce point d'équilibre (x_0), le potentiel peut s'exprimer sous forme de développement limité :

$$V(x) = V(x_0) + (x - x_0).V'(x_0) + \frac{1}{2}.(x - x_0)^2.V''(x_0) + \dots$$

Au point d'équilibre, on doit avoir $V'(x_0) = 0$; donc, en posant $x_0 = 0$:

$$V(x) - V(0) \approx \frac{1}{2}.x^2.V''(0) + \dots$$

Lorsque $|x|$ est suffisamment petit, on peut négliger les puissances d'exposant supérieur à 2; l'énergie potentielle E_p de l'atome s'écrit alors :

$$E_p \approx m.(V(x) - V(0)) \approx m.\frac{V''(0)}{2}.x^2.$$

Posons $k = m.V''(0)$. On a alors : $E_p \approx \frac{1}{2}.k.x^2$. La force de rappel est donc : $F = -\frac{dE_p}{dx} = k.x$. Elle est proportionnelle à x , donc nous sommes ramenés à l'exemple étudié précédemment.

Nous allons reprendre la formule obtenue ci-dessus : $E = \frac{1}{2}.\left(\frac{p^2}{m} + m.\omega^2.x^2\right)$, puis nous allons la transposer à la mécanique quantique en utilisant les opérateurs selon la règle de correspondance, et l'appliquer à la fonction d'onde Ψ de notre atome :

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_X^2}{2.m} + \frac{1}{2}.m.\omega^2.\hat{X}^2.$$

Pour rendre cette équation plus facile à utiliser, nous allons faire des changements de variables. Posons :

$$\hat{\phi} = \frac{1}{\sqrt{m.\hbar.\omega}}.\hat{P}_X \quad \text{et} \quad \hat{\mathfrak{N}} = \sqrt{\frac{m.\omega}{\hbar}}.\hat{X};$$

$$\hat{P}_X = \sqrt{m.\hbar.\omega}.\hat{\phi} \quad \text{et} \quad \hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{m.\omega}}.\hat{\mathfrak{N}};$$

On a alors :

$$\frac{\hat{P}_X^2}{2.m} = \frac{m.\hbar.\omega.\hat{\phi}^2}{2.m} = \frac{\hbar.\omega}{2}.\hat{\phi}^2;$$

$$\frac{1}{2}.m.\omega^2.\hat{X}^2 = \frac{1}{2}.m.\omega^2.\frac{\hbar}{m.\omega}.\hat{\mathfrak{N}}^2 = \frac{\hbar.\omega}{2}.\hat{\mathfrak{N}}^2.$$

ce qui entraîne :

$$\hat{H} = \frac{\hbar.\omega}{2}.\left(\hat{\mathfrak{N}}^2 + \hat{\phi}^2\right).$$

Pour simplifier cette expression, nous avons la tentation de la factoriser ainsi : $\hat{\mathfrak{N}}^2 + \hat{\phi}^2 = (\hat{\mathfrak{N}} + i.\hat{\phi}) \circ (\hat{\mathfrak{N}} - i.\hat{\phi})$. Mais cette égalité est fautive, car les opérateurs ne commutent pas! En effet :

$$(\hat{\mathfrak{N}} + i.\hat{\phi}) \circ (\hat{\mathfrak{N}} - i.\hat{\phi}) = \hat{\mathfrak{N}}^2 - i.\hat{\mathfrak{N}} \circ \hat{\phi} + i.\hat{\phi} \circ \hat{\mathfrak{N}} + \hat{\phi}^2 = \hat{\mathfrak{N}}^2 + \hat{\phi}^2 - i.[\hat{\mathfrak{N}}, \hat{\phi}].$$

Il faut donc calculer $[\hat{N}, \hat{\phi}]$, c'est-à-dire le commutateur des deux opérateurs \hat{N} et $\hat{\phi}$: $[\hat{N}, \hat{\phi}] = \hat{N} \circ \hat{\phi} - \hat{\phi} \circ \hat{N}$.

$$\hat{N} \circ \hat{\phi} = \left(\sqrt{\frac{m \cdot \omega}{\hbar}} \cdot \hat{X} \right) \circ \left(\frac{1}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega}} \cdot \hat{P}_X \right) = \frac{1}{\hbar} \cdot \hat{X} \circ \hat{P}_X ;$$

$$\hat{\phi} \circ \hat{N} = \left(\frac{1}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega}} \cdot \hat{P}_X \right) \circ \left(\sqrt{\frac{m \cdot \omega}{\hbar}} \cdot \hat{X} \right) = \frac{1}{\hbar} \cdot \hat{P}_X \circ \hat{X} ;$$

$$[\hat{N}, \hat{\phi}] = \hat{N} \circ \hat{\phi} - \hat{\phi} \circ \hat{N} = \frac{1}{\hbar} \cdot (\hat{X} \circ \hat{P}_X - \hat{P}_X \circ \hat{X}) = \frac{1}{\hbar} \cdot [\hat{X}, \hat{P}_X] = \frac{1}{\hbar} \cdot i \cdot \hbar \cdot \hat{I}d = i \cdot \hat{I}d$$

Rappelons que le calcul du commutateur de \hat{X} et \hat{P}_X a déjà été fait dans le paragraphe sur la fonction de Schrödinger.

Reportons ce résultat dans le calcul précédent :

$$(\hat{N} + i \cdot \hat{\phi}) \circ (\hat{N} - i \cdot \hat{\phi}) = \hat{N}^2 + \hat{\phi}^2 - i \cdot [\hat{N}, \hat{\phi}] = \hat{N}^2 + \hat{\phi}^2 + \hat{I}d.$$

De même :

$$(\hat{N} - i \cdot \hat{\phi}) \circ (\hat{N} + i \cdot \hat{\phi}) = \hat{N}^2 + \hat{\phi}^2 + i \cdot [\hat{N}, \hat{\phi}] = \hat{N}^2 + \hat{\phi}^2 - \hat{I}d.$$

Posons :

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\hat{N} + i \cdot \hat{\phi}) \text{ et } \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\hat{N} - i \cdot \hat{\phi}).$$

Ces deux opérateurs, introduits par Dirac, sont appelés opérateurs d'échelle; le premier, \hat{a} , est nommé "opérateur d'annihilation", et le second, \hat{a}^\dagger , "opérateur de création". Des noms mal choisis, car il ne s'agit pas ici d'annihilation ou de création de particules, mais de changements de régime de vibration.

Ce sont deux opérateurs adjoints; chacun d'eux est le conjugué hermitique de l'autre.

Les deux égalités ci-dessus peuvent s'inverser :

$$\hat{N} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \text{ et } \hat{\phi} = \frac{i}{\sqrt{2}} \cdot (\hat{a}^\dagger - \hat{a}).$$

$$\hat{P}_X = \sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega} \cdot \hat{\phi} = i \cdot \sqrt{\frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2}} \cdot (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) ;$$

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{m \cdot \omega}} \cdot \hat{N} = \sqrt{\frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega}} \cdot (\hat{a}^\dagger + \hat{a}).$$

On peut également remarquer que :

$$\hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger = \frac{1}{2} \cdot (\hat{N} + i \cdot \hat{\phi}) \circ (\hat{N} - i \cdot \hat{\phi}) = \frac{1}{2} \cdot (\hat{N}^2 + \hat{\phi}^2 + \hat{I}d) ;$$

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} &= \frac{1}{2} \cdot (\hat{\mathfrak{N}} - i \cdot \hat{\wp}) \circ (\hat{\mathfrak{N}} + i \cdot \hat{\wp}) = \frac{1}{2} \cdot (\hat{\mathfrak{N}}^2 + \hat{\wp}^2 - \hat{I}d) ; \\ \hat{\mathfrak{N}}^2 + \hat{\wp}^2 &= 2 \cdot \hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger - \hat{I}d = 2 \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + \hat{I}d ; \\ \hat{H} &= \frac{\hbar \cdot \omega}{2} \cdot (\hat{\mathfrak{N}}^2 + \hat{\wp}^2) = \frac{\hbar \cdot \omega}{2} \cdot (2 \cdot \hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger - \hat{I}d) = \frac{\hbar \cdot \omega}{2} \cdot (2 \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + \hat{I}d).\end{aligned}$$

Posons $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a}$ (c'est l'"opérateur numéro"). On a ;

$$\hat{H} = \hbar \cdot \omega \cdot \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \cdot \hat{I}d \right).$$

N'oublions pas que nous travaillons ici sur des opérateurs, qui opèrent sur l'ensemble des fonctions d'onde qui sont solutions de l'équation de Schrödinger. Cet ensemble peut être considéré comme un espace vectoriel de dimension infinie. Comme en dimension finie, un opérateur peut posséder des vecteurs propres (en l'occurrence, ces "vecteurs" sont des fonctions d'onde, que nous appellerons aussi "états propres") et des valeurs propres. Un vecteur propre de l'opérateur \hat{N} , associé à une valeur propre n (nombre réel, pas nécessairement entier), est une fonction d'onde Ψ_n telle que : $\hat{N}(\Psi_n) = n \cdot \Psi_n$. Cette égalité entraîne :

$$\begin{aligned}\hat{H}(\Psi_n) &= \hbar \cdot \omega \cdot \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \cdot \hat{I}d \right) (\Psi_n) = \hbar \cdot \omega \cdot \hat{N}(\Psi_n) + \frac{\hbar \cdot \omega}{2} \cdot \Psi_n ; \\ \hat{H}(\Psi_n) &= \hbar \cdot \omega \cdot n \cdot \Psi_n + \frac{\hbar \cdot \omega}{2} \cdot \Psi_n = \hbar \cdot \omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \Psi_n.\end{aligned}$$

Ceci prouve que \hat{H} possède exactement les mêmes vecteurs propres que \hat{N} (ce sont les Ψ_n), mais associés à des valeurs propres différentes : $\hbar \cdot \omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)$ à la place de n .

Selon le principe de correspondance, ceci se traduira par :

$$E_n = \hbar \cdot \omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

En physique quantique, on étudie les états stationnaires des fonctions d'onde, donc ici le but va être d'analyser les vecteurs propres (ou états propres) et les valeurs propres de \hat{H} , donc de \hat{N} .

Pour cela, nous avons besoin de préciser quelques propriétés des opérateurs \hat{a} , \hat{a}^\dagger et \hat{N} . Nous allons utiliser des notations simplifiées. Par exemple, lorsque nous écrivons $\Psi_n^* \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} \cdot \Psi_n$, il faut comprendre que Ψ_n^* est le conjugué de Ψ_n (au sens des nombres complexes), \hat{a}^\dagger est le conjugué hermitique de \hat{a} (on a donc $(\hat{a} \cdot \Psi_n)^\dagger = \Psi_n^* \cdot \hat{a}^\dagger$), $\hat{a}^\dagger \cdot \hat{a}$ signifie $\hat{a}^\dagger \circ \hat{a}$. D'autre part, $\|\Psi\|^2 = \Psi^* \cdot \Psi$.

- première propriété (rappel) :

$$\hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} = \hat{N}.$$

- deuxième propriété : sachant que $\aleph^2 + \wp^2 = 2.\hat{a}.\hat{a}^\dagger - \hat{I}d = 2.\hat{a}^\dagger.\hat{a} + \hat{I}d$, on déduit que :

$$\begin{aligned}\hat{a}.\hat{a}^\dagger &= \hat{a}^\dagger.\hat{a} + \hat{I}d ; \\ \hat{a}^\dagger.\hat{a} &= \hat{a}.\hat{a}^\dagger - \hat{I}d.\end{aligned}$$

- troisième propriété (rappel) :

$$\hat{N}.\Psi_n = n.\Psi_n.$$

- quatrième propriété :

$$\|\hat{a}(\Psi_n)\|^2 = \|\hat{a}.\Psi_n\|^2 = (\hat{a}.\Psi_n)^\dagger.(\hat{a}.\Psi_n) = \Psi_n^*.\hat{a}^\dagger.\hat{a}.\Psi_n = \Psi_n^*.\hat{N}.\Psi_n = \Psi_n^*.n.\Psi_n ;$$

$$\|\hat{a}(\Psi_n)\|^2 = n.\|\Psi_n\|^2.$$

Ceci prouve que : $n \geq 0$.

- cinquième propriété :

$$\hat{N}.\hat{a}.\Psi_n = \hat{a}^\dagger.\hat{a}.\hat{a}.\Psi_n = (\hat{a}.\hat{a}^\dagger - \hat{I}d).\hat{a}.\Psi_n = \hat{a}.\hat{a}^\dagger.\hat{a}.\Psi_n - \hat{a}.\Psi_n ;$$

$$\hat{N}.\hat{a}.\Psi_n = \hat{a}.\hat{N}.\Psi_n - \hat{a}.\Psi_n = \hat{a}.n.\Psi_n - \hat{a}.\Psi_n ;$$

$$\hat{N}.\hat{a}.\Psi_n = (n-1).\hat{a}.\Psi_n.$$

Ceci prouve (à condition qu'on ait $\hat{a}.\Psi_n \neq 0$, donc $n \neq 0$) que $\hat{a}.\Psi_n$ est un vecteur propre de l'opérateur \hat{N} , associé à la valeur propre $n-1$:

$$\hat{a}.\Psi_n = \Psi_{n-1} \quad (\text{à un coefficient multiplicatif près}).$$

Pour $n=0$, on a $\hat{a}.\Psi_n = 0$, donc l'égalité se réduit à $0=0$, et on ne peut tirer aucune conclusion.

- sixième propriété :

$$\hat{N}.\hat{a}^\dagger.\Psi_n = \hat{a}^\dagger.\hat{a}.\hat{a}^\dagger.\Psi_n = \hat{a}^\dagger.(\hat{a}^\dagger.\hat{a} + \hat{I}d).\Psi_n ;$$

$$\hat{N}.\hat{a}^\dagger.\Psi_n = \hat{a}^\dagger.(\hat{N} + \hat{I}d).\Psi_n = \hat{a}^\dagger.\hat{N}.\Psi_n + \hat{a}^\dagger.\Psi_n ;$$

$$\hat{N}.\hat{a}^\dagger.\Psi_n = \hat{a}^\dagger.n.\Psi_n + \hat{a}^\dagger.\Psi_n = (n+1).\hat{a}^\dagger.\Psi_n.$$

Ceci prouve que $\hat{a}^\dagger.\Psi_n$ est un vecteur propre de l'opérateur \hat{N} , associé à la valeur propre $n+1$:

$$\hat{a}^\dagger.\Psi_n = \Psi_{n+1} \quad (\text{à un coefficient multiplicatif près}).$$

- septième propriété : toutes les valeurs propres sont entières.

S'il existait une valeur propre n dans l'intervalle $]0, 1[$, alors, d'après la propriété 5, $n-1$ serait aussi une valeur propre, et serait négative, ce qui est interdit d'après la propriété 4. Donc il n'y a pas de valeur propre dans l'intervalle

]0, 1[. S'il existait une valeur propre n dans l'intervalle]1, 2[, alors $n - 1$ serait une valeur propre située dans l'intervalle]0, 1[; nous venons de dire que c'est impossible. Par récurrence, on montre qu'il n'y a pas de valeur propre dans les intervalles]2, 3[,]3, 4[, etc. Donc toutes les valeurs propres sont entières (et tous les entiers naturels sont des valeurs propres).

En définitive, nous voyons que l'hamiltonien \hat{H} admet pour valeurs propres tous les entiers naturels; il admet aussi une infinité d'états propres : Ψ_0, Ψ_1, Ψ_2 , etc. Ces états propres sont des fonctions d'onde.

L'opérateur \hat{a}^\dagger permet de passer, mathématiquement, de Ψ_n à Ψ_{n+1} , et, inversement, \hat{a} permet de passer de Ψ_{n+1} à Ψ_n .

Nous allons maintenant calculer Ψ_0 , c'est-à-dire l'état propre associé à la valeur propre 0. On doit donc avoir : $\hat{H}.\Psi_0 = 0$, donc $\hat{N}.\Psi_0 = 0$. Nous avons vu que $|\hat{a}.\Psi_n|^2 = n.|\Psi_n|^2$; pour $n = 0$, on aura donc aussi $\hat{a}.\Psi_0 = 0$.

Rappelons que $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}.(\hat{\mathfrak{N}} + i.\hat{\phi})$, que $\hat{\mathfrak{N}} = \sqrt{\frac{m.\omega}{\hbar}}.\hat{X}$, et que $\hat{\phi} = \frac{1}{\sqrt{m.\hbar.\omega}}.\hat{P}_X$.

Nous devons donc résoudre cette équation :

$$\hat{a}.\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}.\left(\sqrt{\frac{m.\omega}{\hbar}}.\hat{X} + i.\frac{1}{\sqrt{m.\hbar.\omega}}.\hat{P}_X\right).\Psi_0 = 0.$$

Selon le principe de correspondance, nous remplaçons \hat{X} par x et \hat{P}_X par $-i\hbar.\frac{\partial}{\partial x}$; ce qui nous donne :

$$\sqrt{\frac{m.\omega}{\hbar}}.x.\Psi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{m.\hbar.\omega}}.\hbar.\frac{\partial\Psi_0(x)}{\partial x} = 0 ;$$

$$\frac{\partial\Psi_0(x)}{\partial x} = -\frac{m.\omega}{\hbar}.x.\Psi_0(x).$$

Les solutions de cette équation sont de la forme :

$$\Psi_0(x) = K.e^{-\frac{m.\omega}{2.\hbar}.x^2}.$$

A partir de Ψ_0 (fonction d'onde de notre atome à l'état fondamental), on peut déduire les autres états propres (fonctions d'onde du même atome à ses différents niveaux d'excitation) grâce à la formule : $\Psi_{n+1} = \hat{a}^\dagger.\Psi_n$. On obtient :

$$\Psi_1(x) = x.e^{-\frac{m.\omega}{2.\hbar}.x^2} \quad \text{à un coefficient multiplicatif près ;}$$

$$\Psi_2(x) = \left(2.\frac{m.\omega}{\hbar}.x^2 - 1\right).e^{-\frac{m.\omega}{2.\hbar}.x^2} \quad \text{à un coefficient multiplicatif près ; etc.}$$

Au point où nous sommes arrivés, une petite récapitulation n'est pas inutile.

Nous avons choisi d'étudier les oscillations d'un atome autour de sa position d'équilibre, dans un réseau cristallin, en utilisant l'équation de Schrödinger.

Par rapport à la mécanique classique, nous avons vu apparaître deux différences essentielles :

- Première différence : alors qu'en mécanique classique l'énergie vibratoire de l'atome peut varier de manière continue, ici elle ne peut prendre que des valeurs discrètes : elle est quantifiée ;

- Seconde différence : le niveau d'énergie le plus bas (l'état fondamental) n'est pas nul : il est égal à $\frac{\hbar \cdot \omega}{2}$. C'est l'énergie du point zéro.

Ceci signifie que, même à très basse température, les atomes du réseau cristallin continuent tous à vibrer. On ne peut pas annuler leur énergie et leur impulsion et, en même temps, fixer leur position. Si notre atome est à son niveau fondamental, sa fonction d'onde est $\Psi_0(x) = K \cdot e^{-\frac{m \cdot \omega}{2 \cdot \hbar} \cdot x^2}$, et, selon l'interprétation de Born, sa position ne peut être estimée que de manière probabiliste, la probabilité de présence en x étant proportionnelle à $|\Psi_0(x)|^2$.

Bien entendu, notre atome ne peut passer d'un niveau d'excitation donné (n) à un niveau supérieur ($n + 1$) que grâce à l'apport d'un quantum d'énergie, fourni par un atome voisin ; inversement, lorsqu'il descend du niveau $n + 1$ au niveau n , il libère un quantum qui est récupéré par un autre atome. Le réseau cristallin est le siège d'échanges continus.

Ce qui est tout à fait curieux, c'est que, dans un réseau donné, l'intervalle entre deux niveaux d'énergie successifs d'un atome est toujours le même. On a donc imaginé des particules fictives (ou quasi-particules), les phonons, porteuses de ces quanta d'énergie. Ceci permet de modéliser le réseau en termes de particules plutôt que d'ondes, ce qui, dans certains cas, peut être pratique. En tant que particules matérielles, ces phonons n'existent pas, mais en raisonnant comme s'ils existaient, on simplifie les calculs.

En réalité, un réseau cristallin est plus complexe. L'usage est de distinguer deux sous-ensembles : d'une part les noyaux avec leurs cortèges d'électrons proches (les ions), d'autre part les électrons situés sur des orbites excentrées. On étudie le comportement de ces électrons périphériques en supposant les ions immobiles, puis les oscillations des ions en supposant les électrons périphériques uniformément répartis, et enfin on fait intervenir le couplage entre ces deux sous-ensembles.

S'il n'y avait que des électrons, la situation serait plus simple, car (comme toutes les particules chargées) ils interagissent par échange de photons, et non de phonons.

12 Les relations d'incertitude de Heisenberg

Nous allons poursuivre notre exemple d'oscillateur quantique. Nous allons utiliser ici la notation de Dirac. Pour calculer la norme d'une fonction d'onde Ψ (complexe), avec une seule dimension spatiale, on procède ainsi : $\|\Psi\|^2 = \Psi^* \cdot \Psi = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \cdot \Psi(x) dx$, où Ψ^* est le conjugué de Ψ , au sens des nombres complexes : le conjugué de $a + i.b$ est $a - i.b$ (a, b réels). Avec trois dimensions d'espace, on écrirait :

$$\|\Psi\|^2 = \iiint_{R^3} \Psi^*(x, y, z) \cdot \Psi(x, y, z) dx dy dz.$$

D'un point de vue formel, Ψ est un élément de l'ensemble \mathcal{E} des fonctions d'ondes solutions de l'équation de Schrödinger, qui est un espace de Hilbert, tandis que Ψ^* appartient à l'espace dual \mathcal{E}^* des applications linéaires opérant sur cet ensemble.

La notation de Dirac est la suivante :

$$\|\Psi\|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle$$

où la partie droite $|\Psi\rangle$ est appelé un "ket" (élément de \mathcal{E}) et la partie gauche $\langle \Psi|$ un "bra" (élément de \mathcal{E}^*).

Le bra $\langle \Psi|$ est le conjugué hermitique du ket $|\Psi\rangle$.

Le produit scalaire de deux éléments Φ, Ψ de \mathcal{E} ne s'écrira plus $\Phi^* \cdot \Psi$, mais $\langle \Phi | \Psi \rangle = \int_R \Phi^*(x) \cdot \Psi(x) dx$ (en dimension un).

Si un opérateur \hat{A} opère sur Ψ , le produit scalaire de Φ par $\hat{A}(\Psi)$ s'écrira : $\langle \Phi | \hat{A} | \Psi \rangle$.

Dans cette écriture, la position centrale de l'opérateur \hat{A} suggère qu'il pourrait éventuellement opérer aussi bien sur le ket $|\Psi\rangle$ que sur le bra $\langle \Phi|$. Cependant, si on veut qu'il opère sur le bra, il faut le remplacer par son conjugué hermitique (ou opérateur adjoint) \hat{A}^\dagger . On utilisera alors la formule :

$$\langle \Phi | \hat{A} | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \hat{A}^\dagger | \Phi \rangle.$$

Au lieu de faire opérer \hat{A} sur le ket, on fait opérer son adjoint \hat{A}^\dagger sur le bra.

Un opérateur \hat{A} correspondant à une observable (par exemple : position, énergie, impulsion d'une particule) doit nécessairement être hermitique, c'est-à-dire qu'on doit avoir : $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. Ceci vient du fait que le résultat d'une mesure est toujours réel, et non complexe. Cette propriété est bien entendu vérifiée par \hat{X} et par \hat{P}_X , mais aussi par \hat{N} et par $\hat{\phi}$ (qui leur sont proportionnels) ; quant aux opérateurs $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\hat{N} + i \cdot \hat{\phi})$ et $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\hat{N} - i \cdot \hat{\phi})$, ils ne sont pas hermitiques,

mais sont conjugués l'un de l'autre (c'est ce qui justifie la notation \hat{a}^\dagger). Ceci résulte de manière immédiate des propriétés de la conjugaison hermitique :

- 1) $(\lambda)^\dagger = \lambda^*$;
- 2) $(\lambda.\hat{A})^\dagger = \hat{A}^\dagger.\lambda^*$;
- 3) $(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$;
- 4) $(\hat{A}.\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger.\hat{A}^\dagger$.
- 5) $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$.

Dans la quatrième formule, noter l'ordre des facteurs : le conjugué d'un produit est égal au produit des conjugués, dans l'ordre inverse.

Montrons maintenant que les états propres que nous avons obtenus dans l'étude de l'oscillateur quantique sont orthogonaux, c'est-à-dire que les produits scalaires de la forme $\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle$ sont nuls pour m et n entiers naturels, $m \neq n$.

Commençons par $m = 0$ (et $n > 0$).

$$\langle \Psi_n | \Psi_0 \rangle = \Psi_n^* \cdot \Psi_0 = (\hat{a}^\dagger \cdot \Psi_{n-1})^\dagger \cdot \Psi_0 = \Psi_{n-1} \cdot \hat{a} \cdot \Psi_0.$$

Sachant que $\hat{a} \cdot \Psi_0 = 0$, nous concluons que $\langle \Psi_n | \Psi_0 \rangle = 0$, et également $\langle \Psi_0 | \Psi_n \rangle = 0$, pour tout $n > 0$.

Passons à $m = 1$ (et $n > 1$).

$$\langle \Psi_n | \Psi_1 \rangle = \Psi_n^* \cdot \Psi_1 = (\hat{a}^\dagger \cdot \Psi_{n-1})^\dagger \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \Psi_0 = \Psi_{n-1}^* \cdot \hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \Psi_0.$$

Nous avons vu que $\hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + \hat{I}d$, donc :

$$\langle \Psi_n | \Psi_1 \rangle = \Psi_{n-1}^* \cdot (\hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + \hat{I}d) \cdot \Psi_0 = \Psi_{n-1}^* \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} \cdot \Psi_0 + \Psi_{n-1}^* \cdot \Psi_0.$$

Nous savons maintenant que $\Psi_{n-1}^* \cdot \Psi_0 = 0$, donc il nous reste :

$$\langle \Psi_n | \Psi_1 \rangle = \Psi_{n-1}^* \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} \cdot \Psi_0.$$

Comme $\hat{a} \cdot \Psi_0 = 0$, on obtient : $\langle \Psi_n | \Psi_1 \rangle = 0$, et également $\langle \Psi_1 | \Psi_n \rangle = 0$, pour $n > 1$.

Passons à $m = 2$ (et $n > 2$).

$$\langle \Psi_n | \Psi_2 \rangle = \Psi_n^* \cdot \Psi_2 = (\hat{a}^\dagger \cdot \Psi_{n-1})^\dagger \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \Psi_1 = \Psi_{n-1}^* \cdot \hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \Psi_1 ;$$

$$\langle \Psi_n | \Psi_2 \rangle = \Psi_{n-1}^* \cdot (\hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + \hat{I}d) \cdot \Psi_1 = \Psi_{n-1}^* \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} \cdot \Psi_1 + \Psi_{n-1}^* \cdot \Psi_1.$$

Nous savons maintenant que $\Psi_{n-1}^* \cdot \Psi_1 = 0$, donc il nous reste :

$$\langle \Psi_n | \Psi_2 \rangle = \Psi_{n-1}^* \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} \cdot \Psi_1 = (\hat{a} \cdot \Psi_{n-1})^* \cdot \Psi_0 = \Psi_{n-2}^* \cdot \Psi_0.$$

Nous avons vu que $\Psi_{n-2}^* \cdot \Psi_0 = 0$, donc : $\langle \Psi_n | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | \Psi_n \rangle = 0$, pour $n > 2$.

On peut raisonner par récurrence. Passons directement à $\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle$, avec $n > m$:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_n | \Psi_m \rangle &= \Psi_n^* \cdot \Psi_m = (\hat{a}^\dagger \cdot \Psi_{n-1})^\dagger \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \Psi_{m-1} = \Psi_{n-1}^* \cdot \hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \Psi_{m-1} ; \\ \langle \Psi_n | \Psi_m \rangle &= \Psi_{n-1}^* \cdot (\hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + \hat{I}d) \cdot \Psi_{m-1} = \Psi_{n-1}^* \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} \cdot \Psi_{m-1} + \Psi_{n-1}^* \cdot \Psi_{m-1} ; \\ \langle \Psi_n | \Psi_m \rangle &= \Psi_{n-1}^* \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} \cdot \Psi_{m-1} + \Psi_{n-1}^* \cdot \Psi_{m-1} = (\hat{a} \cdot \Psi_{n-1})^* \cdot \hat{a} \cdot \Psi_{m-1} + \Psi_{n-1}^* \cdot \Psi_{m-1} ; \\ \langle \Psi_n | \Psi_m \rangle &= \Psi_{n-2}^* \cdot \Psi_{m-2} + \Psi_{n-1}^* \cdot \Psi_{m-1} = \langle \Psi_{n-2} | \Psi_{m-2} \rangle + \langle \Psi_{n-1} | \Psi_{m-1} \rangle . \end{aligned}$$

Le but est de démontrer que $\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle = 0$ pour $n > m$. Si c'est vrai pour $m - 1$ et pour $m - 2$, alors on a $\langle \Psi_{n-1} | \Psi_{m-1} \rangle = 0$ et $\langle \Psi_{n-2} | \Psi_{m-2} \rangle = 0$, donc $\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle = 0$.

Les Ψ_n sont donc orthogonaux deux à deux. Il serait possible de les calibrer pour qu'ils aient tous une norme égale à 1. Ils formeraient alors une base orthonormée de l'ensemble des états. Nous ne le ferons pas ici.

Maintenant, après ce préambule mathématique, revenons à notre sujet. Nous voudrions calculer, pour un état propre Ψ_n la moyenne des abscisses, notée $\langle \hat{X} \rangle$, et la moyenne des impulsions, notée $\langle \hat{P}_X \rangle$.

La moyenne d'une "observable" (position, énergie, impulsion..) définie par un opérateur \hat{A} se calcule ainsi : $\frac{\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$.

Rappelons que $\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega}} \cdot (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$.

$$\begin{aligned} \langle \hat{X} \rangle &= \frac{\langle \Psi_n | \hat{X} | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} = \frac{\langle \Psi_n | \sqrt{\frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega}} \cdot (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} ; \\ \langle \hat{X} \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega}} \cdot \frac{\langle \Psi_n | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} ; \\ \langle \hat{X} \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega}} \cdot \frac{\langle \Psi_n | \hat{a} | \Psi_n \rangle + \langle \Psi_n | \hat{a}^\dagger | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} ; \\ \langle \hat{X} \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega}} \cdot \frac{\langle \Psi_n | \Psi_{n-1} \rangle + \langle \Psi_n | \Psi_{n+1} \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} . \end{aligned}$$

Nous savons que $\langle \Psi_n | \Psi_{n-1} \rangle = \langle \Psi_n | \Psi_{n+1} \rangle = 0$; il s'ensuit que :

$$\langle \hat{X} \rangle = 0.$$

Quel que soit n , la moyenne de l'observable "position" (\hat{X}) pour la fonction d'onde Ψ_n est nulle.

Passons à l'impulsion. Rappelons que $\hat{P}_X = i \cdot \sqrt{\frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2}} \cdot (\hat{a}^\dagger - \hat{a})$.

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_X \rangle &= \frac{\langle \Psi_n | \hat{P}_X | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} = \frac{\langle \Psi_n | i \cdot \sqrt{\frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2}} \cdot (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} ; \\ \langle \hat{P}_X \rangle &= i \cdot \sqrt{\frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2}} \cdot \frac{\langle \Psi_n | \hat{a}^\dagger - \hat{a} | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} ; \\ \langle \hat{P}_X \rangle &= i \cdot \sqrt{\frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2}} \cdot \frac{\langle \Psi_n | \hat{a}^\dagger | \Psi_n \rangle - \langle \Psi_n | \hat{a} | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} . \end{aligned}$$

Comme précédemment, on a $\langle \Psi_n | \hat{a}^\dagger | \Psi_n \rangle = \langle \Psi_n | \Psi_{n+1} \rangle = 0$ et d'autre part $\langle \Psi_n | \hat{a} | \Psi_n \rangle = \langle \Psi_n | \Psi_{n-1} \rangle = 0$, donc :

$$\langle \hat{P}_X \rangle = 0 .$$

Quel que soit n , la moyenne de l'observable "impulsion" (\hat{P}_X) pour la fonction d'onde Ψ_n est nulle.

L'écart type ΔX de l'observable \hat{X} est égal à $\sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle - \langle \hat{X} \rangle^2}$; ici, il se réduit à $\sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle}$, puisque $\langle \hat{X} \rangle = 0$. Il s'identifie donc à la moyenne quadratique : $\Delta X = \sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle}$.

Comme $\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega}} \cdot (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$, on a :

$$\hat{X}^2 = \frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega} \cdot (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \cdot (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) = \frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega} (\hat{a}^2 + \hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2) ;$$

$$(\Delta X)^2 = \langle \hat{X}^2 \rangle = \frac{\langle \Psi_n | \hat{X}^2 | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} ;$$

$$(\Delta X)^2 = \frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega} \cdot \frac{\langle \Psi_n | \hat{a}^2 + \hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2 | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} .$$

Comme $\hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + \hat{I}d$, on a $\hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} = 2 \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + \hat{I}d = 2 \cdot \hat{N} + \hat{I}d$, on a :

$$(\Delta X)^2 = \frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega} \cdot \frac{\langle \Psi_n | \hat{a}^2 + 2 \cdot \hat{N} + \hat{I}d + (\hat{a}^\dagger)^2 | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} .$$

Le numérateur se décompose en quatre termes :

$$\langle \Psi_n | \hat{a}^2 | \Psi_n \rangle = \Psi_n^* \cdot \hat{a} \cdot \hat{a} \cdot \Psi_n = (\hat{a}^\dagger \cdot \Psi_n)^* \cdot \Psi_{n-1} = \Psi_{n+1}^* \cdot \Psi_{n-1} = 0 ;$$

$$\langle \Psi_n | (\hat{a}^\dagger)^2 | \Psi_n \rangle = \Psi_n^* \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a}^\dagger \cdot \Psi_n = (\hat{a} \cdot \Psi_n)^* \cdot \Psi_{n+1} = \Psi_{n-1}^* \cdot \Psi_{n+1} = 0 ;$$

$$\begin{aligned}\langle \Psi_n | 2\hat{N} | \Psi_n \rangle &= 2 \cdot \Psi_n^* \cdot \hat{N} \cdot \Psi_n = 2 \cdot n \cdot \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle ; \\ \langle \Psi_n | \hat{I}d | \Psi_n \rangle &= \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle .\end{aligned}$$

En définitive :

$$(\Delta X)^2 = \frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega} \cdot \frac{(2 \cdot n + 1) \cdot \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} = \frac{\hbar}{m \cdot \omega} \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) ;$$

$$\Delta X = \sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\hbar}{m \cdot \omega} \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)}.$$

Nous pouvons remarquer que, plus le niveau d'excitation n est élevé, plus l'écart type est grand, donc plus la fonction d'onde est dispersée dans l'espace. Remarquons aussi que si nous faisons tendre m vers 0, alors l'incertitude sur la position tend vers l'infini. Une particule de masse nulle ne peut pas être située dans l'espace.

Nous allons faire de même pour l'impulsion :

$$\Delta P_X = \sqrt{\langle \hat{P}_X^2 \rangle - \langle \hat{P}_X \rangle^2} = \sqrt{\langle \hat{P}_X^2 \rangle}.$$

Comme $\hat{P}_X = i \cdot \sqrt{\frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2}} \cdot (\hat{a}^\dagger - \hat{a})$, on a :

$$\hat{P}_X^2 = -\frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2} \cdot (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \cdot (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) = \frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2} \cdot (-(\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + \hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger - \hat{a}^2).$$

$$(\Delta P_X)^2 = \langle \hat{P}_X^2 \rangle = \frac{\langle \Psi_n | \hat{P}_X^2 | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} ;$$

$$(\Delta P_X)^2 = \frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2} \cdot \frac{\langle \Psi_n | -(\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + \hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger - \hat{a}^2 | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle}.$$

Le numérateur va se décomposer en quatre termes, comme pour ΔX . Ils sont identiques, au signe près. Ceux qui ont changé de signe étaient nuls, donc on retrouve une expression équivalente.

$$(\Delta P_X)^2 = \frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2} \cdot \frac{(2 \cdot n + 1) \cdot \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} = (m \cdot \hbar \cdot \omega) \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) ;$$

$$\Delta P_X = \sqrt{\langle \hat{P}_X^2 \rangle} = \sqrt{(m \cdot \hbar \cdot \omega) \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)}.$$

Plus le niveau d'excitation n est élevé, plus l'écart type est grand, donc plus les valeurs possibles de l'impulsion sont dispersées. Remarquons aussi que si nous faisons tendre m vers 0, alors l'incertitude sur l'impulsion tend vers 0. Une

particule de masse nulle a une impulsion parfaitement déterminée.

Effectuons maintenant le produit :

$$\Delta X \cdot \Delta P_X = \sqrt{\frac{\hbar}{m \cdot \omega} \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)} \cdot \sqrt{(m \cdot \hbar \cdot \omega) \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)} ;$$

$$\Delta X \cdot \Delta P_X = \hbar \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right) .$$

Le minimum est atteint pour $n = 0$. On a donc :

$$\Delta X \cdot \Delta P_X \geq \frac{\hbar}{2} .$$

Cette inégalité, qui est l'une des formes du "principe d'incertitude" de Heisenberg, montre qu'on ne peut pas faire tendre vers 0, simultanément, l'incertitude sur la position et l'incertitude sur l'impulsion d'un oscillateur harmonique quantique.

13 L'électrodynamique quantique

Nous avons présenté un oscillateur quantique qui est, évidemment, un système matériel bien réel. Mais les physiciens qui ont travaillé sur l'électrodynamique quantique et sur la théorie quantique des champs ont imaginé le vide comme un milieu peuplé de particules virtuelles, capables d'osciller comme les particules réelles : des oscillateurs virtuels. Comme on ne peut pas annuler l'énergie (réelle) d'une particule réelle (fixer sa position et en même temps annuler sa vitesse), il s'ensuit qu'on ne peut pas non plus annuler l'énergie (virtuelle) des particules virtuelles. On en a conclu que le vide (ou les champs) possèdent une énergie de point zéro. Pourquoi pas... Mais n'oublions pas que cette énergie est virtuelle ! Ce sujet a été médiatisé et monté en épingle, de sorte qu'aujourd'hui on imagine trop souvent que l'expression "énergie du point zéro" équivaut à "énergie du vide", et on se la représente comme une énergie réelle. Il y a là un dérapage qu'il faut dénoncer.

Comme arguments de l'existence d'une énergie du vide, on donne : l'émission spontanée, le décalage de Lamb et l'effet Casimir.

Commençons par l'émission spontanée.

Elle a été définie par Einstein. C'était en 1916 ; le modèle de l'atome de Bohr était donc connu depuis peu. Selon Einstein, en l'absence d'intervention extérieure, un électron situé sur une orbite haute dans un atome tend à retomber spontanément sur une orbite plus basse, selon une loi probabiliste rappelant (mathématiquement) celle de la désintégration radioactive. Pour un atome donné,

la probabilité, pendant une unité de temps, du passage spontané d'un électron du niveau d'énergie E_2 élevé au niveau E_1 moins élevé ($E_1 < E_2$), avec émission d'un photon d'énergie $h\nu = E_2 - E_1$, est donnée par un coefficient A_{21} (le coefficient d'émission spontanée d'Einstein). Par exemple, si on considère un grand nombre $N(t)$ d'atomes possédant un électron au niveau E_2 , alors ce nombre $N(t)$ va décroître spontanément : $\frac{dN(t)}{dt} = -A_{21} \cdot N(t)$, donc $N(t) = N(t_0) \cdot e^{-A_{21} \cdot t}$.

On peut définir également un coefficient d'absorption B_{12} , qui correspond à la probabilité pour l'électron de remonter du niveau E_1 au niveau E_2 , en fonction de la densité de photons ayant l'énergie requise. A partir de ces coefficients, on peut calculer les relations entre les coefficients correspondant à un état d'équilibre dans un nuage de gaz isolé. Ce travail utilise et prolonge les résultats obtenus par Planck.

Par la même occasion, Einstein a également défini l'émission stimulée (émission de photons par des atomes, stimulée par le passage de photons contrôlés par l'expérimentateur). Cette idée sera exploitée plus tard dans la technologie laser.

Bien entendu, à l'origine, ce travail (comme l'étude sur les condensats de Bose-Einstein), ignore les inégalités de Heisenberg, et suppose que l'énergie de chaque niveau est parfaitement déterminée. Il est donc naturel d'envisager une correction marginale, pour prendre en compte les relations d'incertitude et la nature ondulatoire des électrons.

Cette réflexion d'Einstein concernant la circulation de l'énergie dans un nuage de gaz, déjà très intéressante, car elle soulève de nombreuses questions, sera prolongée plus tard par l'étude des condensats de Bose-Einstein (voir plus loin).

Mais, pour les physiciens (parmi lesquels Paul Dirac) qui ont fondé l'électrodynamique quantique, science censée expliquer les échanges d'énergie entre particules chargées, au niveau quantique, l'émission spontanée a été le défi fondateur.

Etudier expérimentalement le phénomène d'absorption n'est pas très difficile. On peut utiliser différentes sources lumineuses et observer l'effet produit sur une cible : arrachage d'électrons (c'est l'effet photoélectrique) ou simplement excitation d'un électron, qui va passer d'un niveau d'énergie à un autre plus élevé (d'une orbitale à une autre). Mais étudier l'émission spontanée est plus difficile. On pourrait considérer l'émission et l'absorption comme deux phénomènes parfaitement symétriques. Mais, du point de vue expérimental, il faudrait remplacer la source par... un aspirateur de photons ! Impossible...

En physique quantique, pour étudier un phénomène quelconque, on se tourne

prioritairement vers la fonction d'onde de Schrödinger. Que nous dit-elle sur ce sujet ? Nous avons vu qu'elle permet de calculer les orbitales des électrons dans l'atome d'hydrogène (et dans d'autres atomes), et les solutions du problème sont des états stables. Un atome isolé, qu'il soit initialement dans son état fondamental ou dans un état excité, n'a aucune raison de changer d'état, donc aucune raison de procéder à une émission spontanée. La loi de l'émission spontanée, définie (mais non approfondie) par Einstein, ressemble, mathématiquement, à celle de la radioactivité α , par exemple ; mais, dans le cas de la radioactivité α , comme l'a suggéré Gamow, la particule α , piégée dans un puits de potentiel à l'intérieur du noyau, a une probabilité non nulle de s'en échapper par effet tunnel. Rien de tel dans l'émission spontanée !

De même qu'on ne peut pas comprendre l'absorption d'un photon en faisant abstraction de la source d'où il provient, on ne peut pas comprendre l'émission spontanée si on oublie que le photon émis est récupéré quelque part. Ces deux phénomènes (l'absorption et l'émission spontanée) ont clairement un point commun : ils font intervenir les relations de l'atome considéré avec son environnement. L'absorption n'est jamais spontanée. Et, par symétrie, l'émission dite spontanée ne l'est pas non plus !

Il est possible de mesurer le taux d'émission "spontanée" d'atomes préalablement excités, placés dans une enceinte (une "cavité") : au bout d'une durée déterminée, on compte les atomes qui sont revenus à l'état fondamental. On s'aperçoit que ce taux n'est pas constant : il dépend de l'environnement matériel, comme le prouve l'expérience !

Pour modéliser l'émission spontanée d'un atome, il faudrait être parfaitement informé sur son environnement matériel, ce qui est bien difficile. Mais ce sont surtout les liens qui s'établissent entre l'atome et son environnement qui vont intervenir. On peut modéliser ces liens (informationnels) par un champ, et étudier les échanges qui vont éventuellement se produire entre l'atome et ce champ. Dans l'électrodynamique quantique, il s'agira des échanges entre les particules chargées et le champ électromagnétique. Il faut donc étudier le "couplage" entre les particules et le champ.

Jusqu'ici, la démarche n'a rien d'illégitime ; mais la planche est glissante...

L'étape suivante consiste à modéliser le champ, et surtout à le quantifier. Dans le paragraphe sur l'oscillateur quantique, nous avons présenté l'exemple très concret d'un réseau cristallin ; nous avons vu apparaître une quantification des niveaux vibratoires des atomes. Pourquoi ne pas imaginer le champ constitué, lui aussi, d'une multitude d'oscillateurs harmoniques ? Pourquoi pas, en effet ; mais dans le cas du réseau cristallin les oscillateurs sont des atomes bien réels, tandis que dans le champ électromagnétique ce sont des "entités" imaginées pour le bon plaisir du physicien.

Dans le cas du réseau cristallin, nous avons dit qu'il était commode de définir des particules fictives (quasi-particules) appelées phonons, correspondant à la différence d'énergie entre deux niveaux successifs d'excitation des atomes : bien que fictives, ces quasi-particules permettent une bonne simplification des calculs de la circulation d'énergie vibratoire dans le réseau. Dans le cas du champ électromagnétique, ne pourrait-on pas, de manière similaire, définir également des particules fictives (qu'on appellerait, par exemple, "photons") correspondant à l'écart d'énergie entre deux états successifs d'excitation des "entités" qui jouent le rôle d'oscillateurs ? Les phonons sont utiles aux physiciens, pourquoi pas ces "photons" ?

Mais remettons un peu les choses en place, pour éviter des interprétations simplistes : il ne faudrait pas croire qu'il existe vraiment dans le vide une infinité d'"entités vibratoires" (les oscillateurs quantiques) ayant une signification matérielle. Celles-ci ne sont que des émanations de l'environnement, c'est-à-dire du monde matériel. Le champ électromagnétique ne fait que transmettre les vibrations des particules chargées de l'Univers. Les "entités vibratoires" dont on parle ici sont destinées à exprimer mathématiquement, en les synthétisant, ces messages venus de tout l'Univers. D'ailleurs, pourquoi ces oscillateurs oscilleraient-ils ? Dans le cas des atomes du réseau cristallin, nous le savons : ils oscillent parce-qu'il existe une force de rappel qui les ramène vers leur position d'équilibre, où le potentiel est extrémal. Les "entités vibratoires" dont on parle ici ne subissent aucune force et ne possèdent aucune position d'équilibre, mais elles traduisent, d'une certaine façon, sous une forme virtuelle, le fait que les particules de l'Univers, dont elles sont des émanations, sont soumises à des forces et oscillent autour de leur position d'équilibre.

La modélisation du champ proposée par l'électrodynamique quantique est très utile, mais, comme pour la formule de Rayleigh-Jeans que certains ont interprétée en faisant intervenir un "gaz de photons" (qu'on retrouvera dans les travaux de Bose, voir plus loin), il y a dès l'origine une ambiguïté sur les concepts, qui a laissé des traces.

Mais la pire erreur serait de croire que ces "entités vibratoires" possèdent une énergie propre. On leur attribue même une "énergie de point zéro", lorsque le champ n'est pas excité. Bien entendu, ce sont les objets matériels dont elles sont l'émanation qui ont une énergie de point zéro ; pas elles !

On a souvent écrit que le vide était constitué d'une infinité d'oscillateurs quantiques dans leur état fondamental, ce qui a conduit à l'idée que sa densité d'énergie était nécessairement infinie. On peut imaginer des méthodes de "renormalisation" pour l'empêcher de diverger, mais sur ce point il n'y a pas d'accord entre les physiciens, et cette densité reste de toute façon considérable, de sorte que, si elle existait vraiment, elle aurait des conséquences invraisemblables sur la courbure de l'Univers. C'est ce qu'on a appelé la "catastrophe du vide". En réalité, il n'y a aucune raison d'attribuer une énergie propre au vide : son rôle

est seulement de transmettre une "information". Et la "catastrophe du vide" n'existe pas.

Passons au décalage de Lamb.

Il concerne le modèle de l'atome d'hydrogène. Nous avons vu que les modèles successifs de l'atome (modèles de Bohr, Sommerfeld, Schrödinger, Dirac) ont permis de coller à la réalité de manière de plus en plus serrée, le dernier modèle (celui, relativiste, de Dirac) ayant permis de comprendre l'effet Zeemann anormal, qui est lié au spin des électrons. Mais il restait une infime anomalie inexpliquée : le décalage de Lamb entre les raies spectrales $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ de la série de Lyman.

Lorsqu'on utilise l'équation de Schrödinger pour étudier la structure de l'atome, on voit clairement deux limites de cette méthode : d'une part, cette équation n'est pas relativiste (problème résolu par Dirac) ; d'autre part, on travaille avec une énergie E et un potentiel $V = -\frac{K.e^2}{r}$, comme s'ils étaient parfaitement définis en chaque point et à chaque instant, sans marge d'erreur, et stables dans le temps. On travaille donc comme si l'électron "savait" à chaque instant, de manière exacte, quelle est la position du noyau de l'atome, et quelle est sa vitesse, et, inversement, comme si le noyau "savait" à chaque instant, de manière tout aussi exacte, quelles sont la position et la vitesse de l'électron. Mais les choses ne se passent pas ainsi. La communication entre le noyau et l'électron est quantifiée. Leurs relations sont turbulentes !

C'est ici qu'intervient le deuxième étage de la fusée "électrodynamique quantique" : c'est Feynman qui est pour une bonne part l'artisan de cette avancée très fructueuse. Son idée est que les processus physiques ne se déroulent pas de manière linéaire, continue, parfaitement déterminée à chaque instant de manière univoque, mais qu'il y a interférence d'un grand nombre de possibles. La nature suit à la fois plusieurs parcours virtuels, qui aboutissent à une synthèse : l'intégrale de chemins. L'interférence des possibles ? Nous sommes ici au cœur de la physique quantique, dans ce qu'elle a de plus déconcertant : la nature telle que nous l'observons est le résultat d'un compromis ; elle est élaborée par des "possibles", dont aucun n'est plus vrai que les autres, mais qui participent tous à l'élaboration d'une synthèse. Les possibles ne sont pas traçables, ils sont évanescents, mais contribuent tous à la synthèse qui, elle, aura un avenir.

Cette démarche de Feynman ramène les calculs de Dirac dans le droit fil des réflexions inspirées par les "quelques expériences classiques" que nous avons rappelées dans le document "physique quantique : généralités". Pour comprendre le réel, il faut étudier le virtuel.

Dans le cas de l'atome d'hydrogène, il faut tenir compte des échanges quantifiés entre le noyau (proton) et l'électron : l'électron émet des "photons cou-

lombiens" qui sont captés par le noyau, et inversement (c'est la base de leur interaction "coulombienne"). Mais il y a aussi des échanges de photons transverses (responsables de la "seagull correction"). Ces échanges sont à l'origine d'effets de recul. Il faut faire intervenir aussi les photons échangés par l'électron avec lui-même (il émet un photon et le récupère plus loin). Ils sont à l'origine de corrections radiatives. Ces photons peuvent former des boucles simples ou multiples. On considère qu'il peut y avoir aussi des interactions entre l'électron (ou le noyau) et leur champ électromagnétique commun, mais il ne s'agit peut-être que d'échanges indirects entre l'électron et le noyau. Tous ces phénomènes, représentables par un grand nombre de diagrammes de Feynman, simples ou moins simples, doivent être évalués avec la plus grande précision possible, ce qui a donné lieu à des calculs d'une extrême complexité. Par "évaluer", entendons : évaluer la probabilité (ou la fréquence de réalisation) de chacun de ces phénomènes. Enfin, un autre facteur, pris en compte depuis peu, est le diamètre du noyau. Actuellement, on arrive à un modèle d'une très grande précision, mais toujours perfectible.

Mais les modèles font aussi intervenir un phénomène plus curieux encore, qui est probablement la véritable cause du décalage de Lamb : on imagine que des paires (e^- , e^+) virtuelles se font et se défont selon une boucle fermée de "création / annihilation" (voir le paragraphe "création et annihilation de particules" dans le document : "physique quantique, généralités"); l'énergie nécessaire à la "création" de ces paires étant prélevée, puis restituée au noyau et/ou à son champ; sous l'effet du champ électrique de l'électron, ces paires (qui sont des dipôles, sortes de petits aimants) s'orienteraient parallèlement à ce champ, et, en échangeant des photons avec l'électron, tendraient à affaiblir temporairement sa charge apparente. Ce phénomène appelé "polarisation du vide" ou "biréfringence du vide" (mais on pourrait parler plutôt de "polarisation du champ"), non observé de manière directe mais fortement suspecté, aurait pour conséquences, non seulement des variations apparentes de la charge de l'électron, mais aussi des variations chaotiques du potentiel associé au noyau.

L'un des résultats de ces interactions complexes est que le noyau, "vu" par l'électron, semble avoir une charge variable; le potentiel V , qui est en principe stable dans l'équation de Schrödinger sous sa forme usuelle, est en réalité fluctuant, ce qui est à l'origine du dédoublement des raies spectrales observé dans l'effet Lamb.

Ce modèle nécessite-t-il le recours à une "énergie du vide" ? Pas du tout : on pourrait plutôt parler de l'"énergie du champ", et encore, on doit se rappeler que ce champ est celui du couple proton + électron, et que "son" énergie n'est en réalité qu'une émanation de celle de ces deux particules.

Enfin, sur l'effet Casimir, nous proposons plus loin (comme d'autre l'ont fait avant nous) une approche qui ne fait pas non plus intervenir l'énergie du vide.

Non, le concept d'"énergie du vide" n'a rien à nous apporter !

La méthode initiée par Feynman, au contraire, a conduit à des résultats d'une précision inédite.

14 Le principe d'équipartition

Selon Boltzmann, un système macroscopique est en équilibre lorsqu'il correspond à l'état le plus probable, c'est-à-dire celui qui peut être réalisé par le plus grand nombre d'états microscopiques. Ces états sont les fondations sur lesquelles peut s'appuyer la physique macroscopique ; mais il est essentiel qu'ils décrivent de manière exhaustive la situation au niveau microscopique, qu'ils soient indépendants et équiprobables.

Mais qu'est-ce qu'un état microscopique ?

Considérons par exemple un ensemble de douze particules A, B, C, \dots, L pouvant posséder chacune cinq niveaux d'énergie : $E_0 = 0, E_1 = 1, E_2 = 2, E_3 = 3$ et $E_4 = 4$.

Tout d'abord, on peut s'intéresser à l'énergie totale du système : elle peut aller de 0 (lorsque les douze particules ont pour énergie 0) à 48 (lorsque les douze particules ont pour énergie 4) ; il y a 49 niveaux possibles ; mais il ne faudrait pas croire qu'ils sont équiprobables ! Ils se situent au niveau global, macroscopique. Passons au niveau microscopique. Distinguons trois approches.

1) Le calcul de Maxwell.

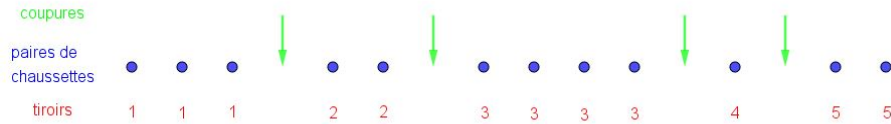
Comme il y a 5 niveaux d'énergie possibles pour chacune des 12 particules, on peut considérer qu'il y a : $5^{12} = 244\ 140\ 625$ combinaisons possibles, donc 244 140 625 états distincts du système, au niveau microscopique. Ces états peuvent être représentés chacun par une suite ordonnée d'éléments pris dans l'ensemble 0, 1, 2, 3, 4 ; par exemple la suite (2, 5, 3, 3, 2, 0, 0, 4, 1, 3, 2, 3) signifie que la particule A a pour énergie 2, que B a pour énergie 5, ..., et que L a pour énergie 3 . Mais ces états sont-ils équiprobables ? A priori, oui, si les douze particules A, B, \dots, L sont considérées comme douze entités individualisées (comme douze personnes : Alain, Bernard, ..., et Louise).

2) Le calcul de Bose et Einstein.

Pour Maxwell, les particules sont individualisées. Mais si ce sont des entités interchangeables, alors la notion d'état microscopique doit être adaptée. Telle est la première idée de Bose.

Dans cette approche, deux suites telles que (2, 5, 3, 3, 2, 0, 0, 4, 1, 3, 2, 3) et (5, 2, 3, 3, 2, 0, 0, 4, 1, 3, 2, 3), par exemple, ne seront plus distinguées : le fait que A et B aient pour énergies 2 et 5 ou 5 et 2 n'a plus d'importance, à partir du moment où on ne distingue plus A de B . Deux suites sont équivalentes si elles contiennent le même nombre de "0", de "1", ..., de "5". Elles définissent alors un même état du système. Le nombre d'états sera alors inférieur à 244 140 625. Voyons comment se fait le calcul, en utilisant le même exemple numérique.

Un problème amusant de combinatoire est celui-ci : si nous disposons de N paires de chaussettes toutes identiques, indiscernables (même couleur, même taille...), combien y a-t-il de façons de les répartir dans M tiroirs ? Le calcul est un peu astucieux, mais élémentaire. On obtient : $C_{M-1}^{N+M-1} = \frac{(N+M-1)!}{N!(M-1)!}$.



Pour répartir ces 12 paires de chaussettes ($N = 12$) dans 5 tiroirs ($M = 5$), nous pouvons procéder ainsi :

- nous alignons les paires de chaussettes (points bleus) dans un ordre quelconque (puisqu'elles sont indiscernables) ;
- nous coupons la rangée en 4 endroits ($M - 1$) de manière à former 5 sous-ensembles (M) ;
- le premier sous-ensemble va aller dans le tiroir 1, le second dans le tiroir 2, etc.

Pour compter le nombre de possibilités, on considère l'ensemble formé par les paires de chaussettes et les coupures ; le nombre d'éléments est : $12 + 4 = 16$, c'est-à-dire $N + M - 1$; les coupures forment un sous-ensemble à 4 éléments ($M - 1$) dans cet ensemble à 16 éléments ($N + M - 1$). Le nombre de façons de disposer les coupures (flèches vertes) est donc :

$$C_{M-1}^{N+M-1} = \frac{(N + M - 1)!}{N! (M - 1)!}$$

$$C_{5-1}^{12+5-1} = C_4^{16} = \frac{16!}{12! 4!} = \frac{13.14.15.16}{2.3.4} = 1\ 820.$$

Dans le cas qui nous intéresse, les tiroirs correspondent aux niveaux d'énergie, et les paires de chaussettes sont les particules qui peuplent ces niveaux. Il y a 1 820 états distincts ; on est bien loin des 244 140 625 états trouvés pour des particules non interchangeables.

On peut se demander ce que signifient ces entités interchangeables. Prenons par exemple les lettres de l'alphabet. Tous les mots de la langue française

peuvent s'écrire en utilisant, une ou plusieurs fois, des lettres prises dans notre alphabet de 26 lettres. Prenons par exemple le mot "lettre", et inversons les deux "e" (ou les deux "t"). On considère alors que le mot n'a pas changé. On admet que les deux "e" sont "la même lettre". Mais on dit quand même que le mot "lettre" est un mot de 6 lettres, et non de 4 lettres. Supposons que dans un jeu imaginé sur le modèle des "chiffres et des lettres" on fasse des tirages de 6 lettres ; le nombre de tirages possibles se calcule ainsi :

$$C_{26-1}^{6+26-1} = C_{25}^{31} = \frac{31!}{25! 6!} = \frac{26.27.28.29.30.31}{2.3.4.5.6} = 736\ 281.$$

Ce qui est très loin de $26^6 = 308\ 915\ 776!$ Le nombre 308 915 776 est le nombre de tirages ordonnés, tels qu'ils apparaissent sur le présentoir. Mais si on regroupe les tirages comportant exactement les mêmes lettres dans un ordre différent, il ne reste que 736 281 tirages réellement différents. C'est ce nombre qui intéresse le candidat qui doit utiliser ces lettres pour former des mots.

Un autre exemple similaire, que nous ne développerons pas ici, est celui des notes de musique.

En ce qui concerne les particules, celles qui suivent les règles définies par Bose et reprises par Einstein sont appelées bosons. Les bosons sont des particules à spin entier. Parmi eux, on classe le photon, les bosons vecteurs de l'interaction faible (Z , W^+ et W^-), et le boson de Higgs. Les noyaux atomiques comportant un nombre pair de nucléons, ou les atomes formés d'un nombre pair de protons, neutrons et électrons, suivent aussi la statistique de Bose-Einstein.

3) Le calcul de Fermi et Dirac.

Certaines particules (appelées fermions) ont la particularité de respecter le principe d'exclusion de Pauli, ce qui signifie que, dans un même système, deux d'entre elles ne peuvent jamais se trouver dans un même état quantique. Par exemple, dans un même atome, deux électrons ne peuvent pas avoir les mêmes nombres quantiques : le nombre quantique principal n associé à l'énergie, le nombre quantique azimutal l , le nombre quantique magnétique m , et le spin. Ces nombres quantiques définissent l'état des électrons dans le système "atome".

En ce qui concerne les particules, celles qui suivent les règles définies par Fermi et Dirac sont appelées fermions. Ce sont des particules à spin demi-entier. Parmi elles, on classe, entre autres, le neutron, le proton, l'électron. Les noyaux atomiques comportant un nombre impair de nucléons, ou les atomes formés d'un nombre impair de protons, neutrons et électrons, suivent aussi la statistique de Fermi-Dirac.

La notion d'équipartition n'est pas la même pour les fermions que pour les bosons ; il en résulte deux types de statistiques quantiques que nous allons rap-

peleer.

15 La statistique de Bose-Einstein

Revenons au corps noir. Après Planck, c'est donc le physicien indien Satyendra Nath Bose qui est l'artisan de l'avancée suivante.

Les calculs de Rayleigh et Jeans donnent le nombre d'ondes stationnaires possibles dans l'enceinte (le four, dont les parois intérieures jouent le rôle de corps noir). Ce sont les états vibratoires autorisés, qu'ils ont comptabilisés exhaustivement. Ces ondes virtuelles doivent être interprétées comme des possibilités virtuelles d'échanges entre les électrons qui s'agitent dans les parois du four, mais les échanges possibles ne se réalisent pas tous à chaque instant. Dans un intervalle de temps donné Δt , certains d'entre eux sont actifs, ou s'"actualisent" (c'est-à-dire transmettent un quantum d'énergie) un certain nombre de fois, selon une loi probabiliste. Si chaque état vibratoire possédait la même probabilité d'occupation (ou d'actualisation), on retomberait sur la loi d'équipartition définie par Maxwell, donc sur la formule de Rayleigh et Jeans, dont on sait qu'elle est fautive. Pourquoi ces états vibratoires n'ont-ils pas la même probabilité de s'actualiser ?

C'est là qu'intervient Bose. Alors que Rayleigh et Jeans se contentaient de comptabiliser le nombre d'"états vibratoires" (qui sont du domaine du virtuel, du non-événement), Bose va comptabiliser toutes les combinaisons des valeurs des N_i (nombre de réalisations des interactions à chaque niveau pendant le temps Δt), ce qui est bien différent ! Il va compter (de manière statistique) les "catastrophes" ! Dans cet intervalle de temps, on admet qu'il y a toujours (à l'équilibre) le même nombre d'échanges : N , et la même quantité d'énergie échangée : E . Donc, en appelant N_i le nombre d'échanges de niveau d'énergie $E_i = h \cdot \nu_i$, on doit avoir : $\sum_i N_i = N$ et $\sum_i E_i = \sum_i N_i \cdot h \cdot \nu_i = E$ (deux contraintes qui interviendront seulement à la fin du calcul). Et ceci permet de sauver l'équipartition : toutes les états ainsi définis sont, à priori, équiprobables, alors que les états vibratoires de Rayleigh et Jeans, eux, ne fonctionnent pas de manière équiprobable.

Dans le cas du corps noir, nous supposons que, pendant le temps Δt , se produisent N_j échanges de niveau E_j . Bien entendu, pendant le même temps, se produisent d'autres échanges de niveau d'énergie différent. Les combinaisons (donc les états du système) sont innombrables ! Tous les états du système sont à priori équiprobables, donc nous allons attribuer un tiroir à chaque état du système (et non un tiroir à chaque niveau d'énergie).

Combien y a-t-il d'états du système correspondant à une valeur donnée de N_j ? Nous n'avons pas besoin de le préciser ; nous nous contenterons d'appeler G_j

ce nombre. Dans le cas du corps noir, on considère les échanges qui se produisent pendant la durée Δt : s'il y a N échanges avec M niveaux d'énergie autorisés, le nombre de combinaisons (ou d'états quantiques) est : $C_{M-1}^{N+M-1} = \frac{(N+M-1)!}{N! (M-1)!}$. Dans ce cas, il est naturel de travailler avec une valeur unique de G_j ; pour tout j , on aura alors :

$$G_j = G = \frac{(N + M - 1)!}{N! (M - 1)!}.$$

Mais dans d'autres situations il pourra y avoir d'autres critères pour faire le décompte des états quantiques, dépendant ou non de j . L'usage est donc de conserver G_j dans les formules, pour une meilleure généralité.

D'après la formule vue précédemment, le nombre de combinaisons sera :

$$\Omega_j = C_{G_j-1}^{G_j+N_j-1} = \frac{(G_j + N_j - 1)!}{N_j! (G_j - 1)!}.$$

C'est le nombre de façons d'obtenir N_j interactions de niveau E_j , à partir des G_j états compatibles.

L'entropie correspondante est :

$$S_j = k_B \cdot \text{Log} \Omega_j = k_B \cdot \text{Log} \frac{(G_j + N_j - 1)!}{N_j! (G_j - 1)!}.$$

Si on fait de même pour les autres niveaux d'énergie, les possibilités se multiplient ($P(A \cap B) = P(A) \cdot P(B)$ si les événements A et B sont indépendants) et les entropies s'additionnent (le logarithme d'un produit est égal à la somme des logarithmes). L'entropie totale est :

$$S = \sum_j S_j = \sum_j k_B \cdot \text{Log} \frac{(G_j + N_j - 1)!}{N_j! (G_j - 1)!}.$$

Quand G_j et N_j sont grands, on peut exprimer la valeur approchée des factorielles grâce à la formule de Stirling, simplifiée de la manière suivante :

$$\text{Log} N! \approx N \cdot \text{Log} N.$$

On obtient alors :

$$S \approx k_B \cdot \sum_j [\text{Log}(G_j + N_j)! - \text{Log} N_j! - \text{Log} G_j!];$$

$$S \approx k_B \cdot \sum_j [(G_j + N_j) \cdot \text{Log}(G_j + N_j) - N_j \cdot \text{Log} N_j - G_j \cdot \text{Log} G_j].$$

Posons : $n_j = \frac{N_j}{G_j}$. Alors que N_j représentait des virtualités (des hypothèses), le nombre n_j représente le peuplement réel moyen du niveau d'énergie E_j . On

peut considérer que c'est un nombre de photons (ou d'échanges) réels (en gardant à l'esprit que ceci n'a qu'une valeur statistique).

Remplaçons N_j par $n_j.G_j$ dans l'égalité ci-dessus :

$$S \approx k_B \cdot \sum_j [(G_j + n_j.G_j).Log(G_j + n_j.G_j) - n_j.G_j.Log(n_j.G_j) - G_j.Log G_j] ;$$

$$S \approx k_B \cdot \sum_j G_j \cdot [(1 + n_j).Log(G_j.(1 + n_j)) - n_j(Log n_j + Log G_j) - Log G_j].$$

La quantité A entre crochets se simplifie :

$$A = (1 + n_j).(Log G_j + Log(1 + n_j)) - n_j(Log n_j + Log G_j) - Log G_j ;$$

$$A = Log G_j + Log(1 + n_j) + n_j.Log G_j + n_j.Log(1 + n_j) - n_j.Log n_j - n_j.Log G_j - Log G_j ;$$

$$A = (1 + n_j).Log(1 + n_j) - n_j.Log n_j.$$

On a donc :

$$S \approx k_B \cdot \sum_j G_j \cdot [(1 + n_j).Log(1 + n_j) - n_j.Log n_j].$$

S'il n'y avait aucune contrainte, les dérivées partielles de l'entropie par rapport à n_j seraient nulles pour tout j . Calculons cette dérivée :

$$\frac{\partial S}{\partial n_j} = k_B \cdot G_j \cdot \frac{\partial}{\partial j} [(1 + n_j).Log(1 + n_j) - n_j.Log n_j] ;$$

$$\frac{\partial S}{\partial n_j} = k_B \cdot G_j \cdot \left[(1 + n_j) \cdot \frac{1}{1 + n_j} + Log(1 + n_j) - n_j \cdot \frac{1}{n_j} - Log n_j \right] ;$$

$$\frac{\partial S}{\partial n_j} = k_B \cdot G_j \cdot [1 + Log(1 + n_j) - 1 - Log n_j] ;$$

$$\frac{\partial S}{\partial n_j} = k_B \cdot G_j \cdot Log \frac{1 + n_j}{n_j} = k_B \cdot G_j \cdot Log \left(1 + \frac{1}{n_j} \right).$$

Mais il y a deux contraintes : le nombre total d'échanges, pendant le temps Δt , doit être constant : $\sum_j N_j = \sum_j n_j.G_j = N$, et la somme énergétique de ces échanges doit être constante aussi : $\sum_j N_j.E_j = \sum_j n_j.G_j.E_j = E$. Dans cette situation, on utilise le principe des multiplicateurs de Lagrange ; selon ce principe, il doit exister deux nombres α et β non nuls, tels que :

$$\frac{\partial}{\partial n_j} [S - \alpha.N - \beta.E] = 0 ;$$

$$\frac{\partial S}{\partial n_j} = \alpha \cdot \frac{\partial}{\partial n_j} (n_j.G_j) + \beta \cdot \frac{\partial}{\partial n_j} (n_j.G_j.E_j) = \alpha.G_j + \beta.G_j.E_j ;$$

$$k_B \cdot G_j \cdot \text{Log} \left(1 + \frac{1}{n_j} \right) = \alpha \cdot G_j + \beta \cdot G_j \cdot E_j ;$$

$$\text{Log} \left(1 + \frac{1}{n_j} \right) = \frac{\alpha}{k_B} + \frac{\beta}{k_B} \cdot E_j ;$$

$$1 + \frac{1}{n_j} = e^{\left(\frac{\alpha}{k_B} + \frac{\beta}{k_B} \cdot E_j \right)} ;$$

$$n_j = \frac{1}{e^{\left(\frac{\alpha}{k_B} + \frac{\beta}{k_B} \cdot E_j \right)} - 1}.$$

Il faut faire appel au premier principe de la thermodynamique pour préciser les valeurs de α et β . Dans le cas du corps noir (qui échange des photons) on a $\alpha = 0$ et $\beta = \frac{1}{T}$; en posant $E_j = h \cdot \nu_j$, on obtient :

$$n_j = \frac{1}{e^{\left(\frac{h \cdot \nu_j}{k_B \cdot T} \right)} - 1}.$$

Il faut encore faire intervenir la "dégénérescence" g_j de chaque niveau d'énergie. Dans le cas des ondes électromagnétiques, c'est 2, car, pour une fréquence donnée, donc à énergie égale, il existe deux polarisations possibles. La formule devient :

$$n_j = \frac{g_j}{e^{\left(\frac{h \cdot \nu_j}{k_B \cdot T} \right)} - 1}.$$

En remplaçant g_j par 2 dans la formule ci-dessus, on obtient une statistique concernant les photons qui circulent dans l'enceinte en fonction de leur énergie (toujours durant un intervalle de temps Δt).

Et Bose retrouve la formule de Planck, qui est enfin démontrée! C'était en 1920.

On aura peut-être remarqué une contradiction dans le raisonnement ci-dessus : nous avons dit que les multiplicateurs de Lagrange α et β devaient être non nuls, et ensuite nous avons choisi $\alpha = 0$. Ceci vient du fait que Bose n'a jamais posé la condition : $\sum_j N_j = \sum_j n_j \cdot G_j = N$; c'est Einstein qui l'a introduite. Et il a remarqué que, dans le "gaz de photons" de Bose, le nombre de photons ne se conserve pas! Ce qui est bien normal : ce n'est pas un gaz!

Le travail de Bose est très remarquable ; son calcul est irréprochable, mais la présentation qu'il en a faite présente plusieurs défauts : le premier, c'est qu'il suppose que les photons situés dans l'enceinte forment une sorte de "gaz de photons", un peu analogue à un gaz parfait constitué d'atomes. C'est inexact, car les atomes interagissent, au moins par des chocs élastiques, et ce sont leurs interactions qui conduisent à une situation d'équilibre. Les photons qui traversent l'enceinte n'interagissent pas entre eux : ils ne font que transmettre des interactions entre les atomes (ou électrons) qui constituent les parois de l'enceinte.

On doit donc considérer que ce sont ces atomes qui interagissent par le biais d'ondes électromagnétiques, et l'équilibre qui s'instaure est un équilibre entre les états vibratoires de ces atomes constituant les parois. L'expression "gaz de photons", souvent employée, est un abus de langage.

Un autre problème est le procédé, utilisé par Bose, qui consiste à partager l'espace en cubes calibrés selon la constante de Planck, ce qui est inutile, et peut prêter à confusion. Cette présentation n'a pas été reprise ici.

Quant à Einstein, qui s'est passionné pour les travaux de Planck, il a été impressionné par les idées de Bose, même si ses explications l'ont laissé perplexe. Il a senti que le sujet méritait d'être approfondi. Il propose en 1924 une généralisation à un nuage d'atomes (un vrai gaz, cette fois). Comme Bose, il a admis que $\beta = \frac{1}{T}$. Puis il a posé : $\alpha = -\mu \cdot \beta$, ce qui entraîne : $\frac{\alpha}{k_B} + \frac{\beta}{k_B} \cdot E_j = \frac{-\mu \cdot \beta + E_j \cdot \beta}{k_B} = \frac{E_j - \mu}{k_B \cdot T}$. La formule s'écrit alors :

$$n_j = \frac{g_j}{e^{\left(\frac{E_j - \mu}{k_B T}\right)} - 1}.$$

Cette formule s'applique à un ensemble (un "nuage") d'atomes isolés dans une enceinte. Le nombre μ est interprété comme un potentiel chimique (énergie de liaison). Si les atomes s'attirent, μ est négatif : il faut fournir de l'énergie pour les séparer. Ce potentiel est nul pour les photons. On désigne par n_j le nombre (moyen) d'échanges énergétiques de niveau E_j (l'ensemble des E_j possibles étant supposé fini). La seule différence par rapport à la formule de Bose réside dans l'interprétation des coefficients α et β .

Le calcul de Bose, qui est à l'origine de ces formules, traite les photons comme des entités interchangeables.

16 La statistique de Fermi-Dirac

En 1926, Fermi et Dirac ont obtenu une formule similaire pour les particules à spin demi-entier (appelées fermions, du nom de Fermi). Présentons cette statistique.

Dans un même système composé de fermions, il ne peut pas y avoir plusieurs particules dans le même état. Pour une même énergie E_j , il y aura, comme précédemment, G_j états comportant chacun N_j particules. On a nécessairement $N_j \leq G_j$. Parmi ces G_j états, N_j sont occupés ($N_j \leq G_j$) ; le nombre de façons de choisir N_j éléments dans un ensemble de G_j éléments est :

$$\Omega_j = C_{N_j}^{G_j} = \frac{G_j!}{N_j! (G_j - N_j)!}.$$

C'est le nombre de façons de sélectionner N_j particules d'énergie E_j , parmi des G_j états compatibles.

L'entropie correspondante est :

$$S_j = k_B \cdot \text{Log} \Omega_j = k_B \cdot \text{Log} \frac{G_j!}{N_j! (G_j - N_j)!}$$

Si on fait de même pour les autres niveaux d'énergie, les possibilités se multiplient et les entropies s'additionnent. L'entropie totale est :

$$S = \sum_j S_j = \sum_j k_B \cdot \text{Log} \frac{G_j!}{N_j! (G_j - N_j)!}$$

Quand G_j et N_j sont grands, on peut exprimer la valeur approchée des factorielles grâce à la formule de Stirling, simplifiée de la manière suivante :

$$\text{Log} N! \approx N \cdot \text{Log} N.$$

On obtient alors :

$$S = k_B \cdot \sum_j [\text{Log} G_j! - \text{Log} N_j! - \text{Log} (G_j - N_j)!] ;$$

$$S \approx k_B \cdot \sum_j [G_j \cdot \text{Log} G_j - N_j \cdot \text{Log} N_j - (G_j - N_j) \cdot \text{Log} (G_j - N_j)] .$$

Posons : $n_j = \frac{N_j}{G_j}$; remplaçons N_j par $n_j \cdot G_j$ dans l'égalité ci-dessus :

$$S \approx k_B \cdot \sum_j [G_j \cdot \text{Log} G_j - n_j \cdot G_j \cdot \text{Log} (n_j \cdot G_j) - (G_j - n_j \cdot G_j) \cdot \text{Log} (G_j - n_j \cdot G_j)] ;$$

$$S \approx k_B \cdot \sum_j G_j \cdot [\text{Log} G_j - n_j \cdot \text{Log} (n_j \cdot G_j) - (1 - n_j) \cdot \text{Log} (G_j - n_j \cdot G_j)] .$$

La quantité B entre crochets se simplifie :

$$B \approx \text{Log} G_j - n_j \cdot (\text{Log} n_j + \text{Log} G_j) - (1 - n_j) \cdot (\text{Log} G_j + \text{Log}(1 - n_j)) ;$$

$$B \approx \text{Log} G_j - n_j \cdot \text{Log} n_j - n_j \cdot \text{Log} G_j - \text{Log} G_j - \text{Log}(1 - n_j) + n_j \cdot \text{Log} G_j + n_j \cdot \text{Log}(1 - n_j) ;$$

$$B \approx -n_j \cdot \text{Log} n_j - \text{Log}(1 - n_j) + n_j \cdot \text{Log}(1 - n_j) ;$$

$$B \approx (n_j - 1) \cdot \text{Log}(1 - n_j) - n_j \cdot \text{Log} n_j .$$

On a donc :

$$S \approx k_B \cdot \sum_j G_j \cdot [(n_j - 1) \cdot \text{Log}(1 - n_j) - n_j \cdot \text{Log} n_j] .$$

S'il n'y avait aucune contrainte, les dérivées partielles de l'entropie par rapport à n_j seraient nulles pour tout j . Calculons cette dérivée :

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial n_j} &= k_B \cdot G_j \cdot \frac{\partial}{\partial j} [(n_j - 1) \cdot \text{Log}(1 - n_j) - n_j \cdot \text{Log } n_j] ; \\ \frac{\partial S}{\partial n_j} &= k_B \cdot G_j \cdot \left[(n_j - 1) \cdot \frac{-1}{1 - n_j} + \text{Log}(1 - n_j) - n_j \cdot \frac{1}{n_j} - \text{Log } n_j \right] ; \\ \frac{\partial S}{\partial n_j} &= k_B \cdot G_j \cdot [1 + \text{Log}(1 - n_j) - 1 - \text{Log } n_j] ; \\ \frac{\partial S}{\partial n_j} &= k_B \cdot G_j \cdot \text{Log} \frac{1 - n_j}{n_j} = k_B \cdot G_j \cdot \text{Log} \left(-1 + \frac{1}{n_j} \right).\end{aligned}$$

Mais il y a deux contraintes : le nombre total d'échanges, pendant le temps Δt , doit être constant : $\sum_j N_j = \sum_j n_j \cdot G_j = N$, et la somme énergétique de ces échanges doit être constante aussi : $\sum_j N_j \cdot E_j = \sum_j n_j \cdot G_j \cdot E_j = E$. Dans cette situation, on utilise le principe des multiplicateurs de Lagrange : il doit exister deux nombres α et β tels que :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial n_j} [S - \alpha \cdot N - \beta \cdot E] &= 0 ; \\ \frac{\partial S}{\partial n_j} &= \alpha \cdot \frac{\partial}{\partial n_j} (n_j \cdot G_j) + \beta \cdot \frac{\partial}{\partial n_j} (n_j \cdot G_j \cdot E_j) = \alpha \cdot G_j + \beta \cdot G_j \cdot E_j ; \\ k_B \cdot G_j \cdot \text{Log} \left(-1 + \frac{1}{n_j} \right) &= \alpha \cdot G_j + \beta \cdot G_j \cdot E_j ; \\ \text{Log} \left(-1 + \frac{1}{n_j} \right) &= \frac{\alpha}{k_B} + \frac{\beta}{k_B} \cdot E_j ; \\ -1 + \frac{1}{n_j} &= e^{\left(\frac{\alpha}{k_B} + \frac{\beta}{k_B} \cdot E_j \right)} ; \\ n_j &= \frac{1}{e^{\left(\frac{\alpha}{k_B} + \frac{\beta}{k_B} \cdot E_j \right)} + 1}.\end{aligned}$$

Il faut faire appel au premier principe de la thermodynamique pour préciser les valeurs de α et β . On doit avoir : $\beta = \frac{1}{T}$; on pose : $\alpha = -\mu \cdot \beta$; on a alors : $\frac{\alpha}{k_B} + \frac{\beta}{k_B} \cdot E_j = \frac{E_j - \mu}{k_B \cdot T}$, et par suite :

$$n_j = \frac{1}{e^{\left(\frac{E_j - \mu}{k_B \cdot T} \right)} + 1}.$$

Il faut encore faire intervenir la "dégénérescence" g_j de chaque niveau d'énergie. La formule devient :

$$n_j = \frac{g_j}{e^{\left(\frac{E_j - \mu}{k_B \cdot T} \right)} + 1}.$$

C'est la formule statistique de Fermi et Dirac, valable pour les fermions.

17 Les condensats de Bose-Einstein

A partir des idées de Bose, Einstein a donc imaginé une application à un vrai gaz formé de vrais atomes (pas un gaz de photons, qui n'existe pas!). Les atomes doivent avoir un spin entier, car ils doivent suivre la statistique de Bose-Einstein. Ils doivent donc comporter un nombre pair de fermions (neutrons, protons, électrons). Reprenons la formule due à Einstein, et supposons qu'il n'y ait pas de dégénérescence ($g_j = 1$). La formule s'écrit alors :

$$n_j = \frac{1}{e^{\left(\frac{E_j - \mu}{k_B \cdot T}\right)} - 1}.$$

Pour que ce nombre soit défini et positif pour tout j , il est indispensable que $\frac{E_j - \mu}{k_B \cdot T}$ soit strictement positif pour tout j . Comme on va avoir $E_0 = 0$, on doit avoir : $\mu < 0$.

Dans le cas du corps noir, n_j représentait le nombre moyen d'échanges (ou de photons) de niveau j , et E_j l'énergie de ces photons (ou des ondes électromagnétiques), donc des échanges énergétiques entre les atomes des parois. Ici, il n'y a pas de parois ; on parle du nombre d'atomes, et de l'énergie de ces atomes.

Considérons donc un nuage formé par un gaz parfait monoatomique à comportement bosonique, piégé dans une enceinte. Comme dans tout autre gaz, les atomes sont animés de mouvements désordonnés, et entrent en collision, se transmettant leur énergie-impulsion par chocs élastiques. Il n'est donc pas utile de faire intervenir des photons, comme dans le cas de l'enceinte du corps noir : les atomes se chargent de transmettre eux-mêmes leur énergie-impulsion, et le font, statistiquement, de la même manière que les photons, puisque ce sont aussi des bosons. La situation est plus simple que dans l'étude du corps noir, où il y avait d'une part les atomes des parois de l'enceinte, émetteurs de photons, et d'autre part les photons eux-mêmes, transmetteurs d'énergie. Ici, chaque atome joue à la fois le rôle d'émetteur et celui de transmetteur. D'autre part, on suppose que ces atomes possèdent un nombre limité de modes de vibration autorisés.

Remarquons que l'énergie E_j prise en compte ici doit pouvoir être échangée entre les atomes par chocs élastiques : c'est donc une énergie cinétique. L'énergie associée à la masse au repos ne contribue pas à ces échanges.

Que se passe-t-il lorsqu'on fait tendre la température T vers 0 ?

Si on admet que le nombre d'atomes ne change pas, et que l'ensemble des énergies autorisées (E_j) ne change pas non plus, alors on voit clairement que, pour tout j (avec $E_j \neq 0$), n_j tend vers 0 quand T tend vers 0 (le zéro absolu). Si on note $E_0 = 0$ et n_0 le nombre correspondant d'occurrences, alors n_0 doit tendre vers N . Ceci signifie que les atomes se transmettent de moins en moins d'énergie, car ils se concentrent dans un état où ils ont tous à peu près la même

énergie : il s'agit de l'état de plus faible énergie, c'est-à-dire l'état fondamental. On peut aussi raisonner à température constante, et ajouter de nouveaux atomes : à partir d'un certain nombre d'atomes, les niveaux d'énergie les plus élevés ne vont plus accepter de nouveaux venus (ils sont saturés) et les atomes nouvellement introduits vont aller se placer directement dans les niveaux les plus bas.

Ceci mérite une explication. Notons n_0 le nombre d'atomes situés dans l'état fondamental ($E_0 = 0$) et n_{exc} le nombre d'atomes excités :

$$n_{exc} = \sum_{j>0} \frac{1}{e^{\left(\frac{E_j - \mu}{k_B \cdot T}\right)} - 1} = N - n_0.$$

Posons : $Z = e^{\left(\frac{\mu}{k_B \cdot T}\right)}$. C'est ce qu'on appelle la fugacité. Puisque $\mu < 0$, on a : $0 < Z < 1$.

On peut remarquer que :

$$e^{\left(\frac{E_j - \mu}{k_B \cdot T}\right)} = \frac{e^{\left(\frac{E_j}{k_B \cdot T}\right)}}{e^{\left(\frac{\mu}{k_B \cdot T}\right)}} = \frac{e^{\left(\frac{E_j}{k_B \cdot T}\right)}}{Z} ;$$

$$n_j = \frac{1}{e^{\left(\frac{E_j - \mu}{k_B \cdot T}\right)} - 1} = \frac{1}{\frac{e^{\left(\frac{E_j}{k_B \cdot T}\right)}}{Z} - 1} = \frac{Z}{e^{\left(\frac{E_j}{k_B \cdot T}\right)} - Z}.$$

Comme $0 < Z < 1$, on a $e^{\left(\frac{E_j}{k_B \cdot T}\right)} - Z > e^{\left(\frac{E_j}{k_B \cdot T}\right)} - 1$, donc $n_j < \frac{1}{e^{\left(\frac{E_j}{k_B \cdot T}\right)} - 1}$.

Par conséquent :

$$n_{exc} < \sum_{j>0} \frac{1}{e^{\left(\frac{E_j}{k_B \cdot T}\right)} - 1}.$$

Le nombre d'atomes excités est donc borné, et il est possible de faire tendre la borne supérieure vers 0 : il suffit de faire tendre T vers 0. La majorité des atomes va alors se placer dans l'état fondamental.

Lorsque le nombre d'atomes excités est égal au maximum autorisé (en fonction de la température T), alors on dit que les niveaux excités sont saturés ; le fait d'ajouter de nouveaux atomes (sans changer la température) les envoie automatiquement dans l'état fondamental.

Les condensats de Bose-Einstein sont devenus un sujet d'études et d'expérimentation très actif ; ils permettent d'approcher au plus près cette notion étrange introduite par Heisenberg : l'état fondamental.

Un autre intérêt de ces nuages d'atomes froids est que la longueur d'onde de de Broglie, $\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$, qui est habituellement négligeable dans les situations

usuelles, peut devenir ici supérieure à la dimension des atomes, ou même à la distance entre atomes voisins, ce qui permet la formation de nuages cohérents (voir le paragraphe sur la cohérence, dans le document "Mécanique quantique : généralités").

Prédit par Einstein en 1925, cet état de la matière n'a été obtenu expérimentalement qu'en 1995 par Eric Cornell et Carl Wieman. Donc Einstein n'a jamais eu la confirmation de la pertinence, ni de l'intérêt, de son idée.

Cette étude permet de mieux comprendre des phénomènes comme la superfluidité.

Avec ces condensats, des idées abstraites prennent corps et deviennent l'objet d'expérimentations précises (on peut penser par exemple à celles de Claude Cohen-Tannoudji).

Cette découverte d'Einstein montre son rôle moteur dans les débuts de la physique quantique : c'est l'interprétation de l'école de Copenhague qui ne lui convenait pas (ce qu'on peut comprendre encore aujourd'hui). Il ne pouvait pas croire que la physique soit probabiliste par essence, et surtout l'intrication était pour lui impensable.

Dans ce travail, il n'y a pas d'idée préconçue sur la nature du niveau fondamental, qui peut être envisagé, de manière classique, comme un niveau d'énergie (cinétique) nulle, ou, à la manière de Heisenberg, comme un niveau d'énergie moyenne $\frac{\hbar v}{2}$ (non nulle). Mais il fournit un moyen d'approcher cette question de manière expérimentale.

18 L'effet Casimir

L'effet Casimir a été prédit en 1948 par le physicien néerlandais Hendrick Casimir ; de quoi s'agit-il ?

Entre deux plaques conductrices non chargées, parallèles entre elles et très proches l'une de l'autre, placées dans le vide, doit apparaître une force attractive. Cet effet est dû au fait qu'entre les deux plaques les seules ondes électromagnétiques stationnaires qui peuvent subsister durablement sont celles dont la longueur d'onde est un diviseur de la distance entre les deux plaques, alors qu'à l'extérieur toutes les longueurs d'ondes sont autorisées, ce qui introduit un biais entre le "vide intérieur" et le "vide extérieur".

Les deux plaques sont supposées parfaitement conductrices et non chargées, pour que les échanges électromagnétiques puissent se faire le plus librement possible : pour se fixer les idées, on pourra supposer qu'à l'intérieur des plaques

les électrons sont totalement libres de leurs mouvements, et que des échanges énergétiques vont se produire entre les électrons des deux plaques, par l'intermédiaire de rayonnements électromagnétiques.

Le premier essai de vérification expérimentale date de 1958 (résultat positif, mais avec une marge d'erreur de 100%). La marge d'erreur a été réduite à 25% en 1950, et à 1% en 1990. L'effet Casimir est aujourd'hui considéré comme bien établi.

Mais son interprétation peut encore être discutée. Une question qu'on peut se poser est la suivante : permet-il d'"extraire" de l'énergie du vide ? Dans notre optique, le vide quantique ne possède aucune énergie réelle pouvant être exploitée comme une ressource inépuisable, mais seulement une énergie virtuelle ; il ne peut jouer qu'un rôle d'intermédiaire en acheminant des informations qui modulent les échanges d'énergie-impulsion entre les deux plaques, et aussi entre les plaques et le monde extérieur.

Considérons deux plaques parfaitement conductrices, non chargées, parallèles entre elles, de mêmes dimensions (par exemple deux carrés de côté égal à $L = L_x = L_y$), très proches l'une de l'autre (distance : $L_z = a$, selon l'axe z).

Des échanges thermiques vont s'établir dans l'espace intérieur entre les deux plaques, par le biais d'ondes électromagnétiques ; mais aussi à l'extérieur, entre ces plaques et le reste de l'Univers. Les échanges entre les deux plaques vont produire des forces répulsives (pression de radiation) ; les échanges avec le monde extérieur vont produire des forces attractives. Si les plaques sont plus chaudes que le monde extérieur, les forces répulsives vont l'emporter. Mais si elles sont à la même température que le monde extérieur, que se passe-t-il ? Et si cette température est nulle, l'énergie du point zéro peut-elle jouer un rôle ?

L'une des idées de Casimir est d'imaginer une enceinte à parois parfaitement conductrices, de dimensions (L, L, L) , partagée par un plan (une plaque également conductrice), de manière à former deux enceintes de dimensions (L, L, a) (l'"intérieur") et $(L, L, L - a)$ (l'"extérieur"), puis de faire varier a , pour comparer l'énergie "intérieure" avec l'énergie "extérieure". D'autre part, il raisonne à la manière de Rayleigh et Jeans, sans faire intervenir les idées de Planck ; il admet le postulat d'équipartition, et n'envisage aucun phénomène d'amortissement de la probabilité en fonction de l'énergie.

Revenons donc en arrière, à l'époque où la loi de Planck était inconnue. Rappelons-nous cette formule démontrée dans la section sur le corps noir, approche de Rayleigh et Jeans, appliquée à une enceinte de dimensions L_x, L_y et L_z :

$$E_{(\text{fréquence} \leq \nu)} = \frac{2 \cdot \pi \cdot h \cdot \nu^4}{c^3} \cdot L_x \cdot L_y \cdot L_z ;$$

$$E_{(\text{long, d'onde} \geq \lambda)} = \frac{2\pi \cdot h \cdot c}{\lambda^4} \cdot L_x \cdot L_y \cdot L_z.$$

Ces formules résultent du décompte des modes d'oscillation des ondes électromagnétiques stationnaires piégées dans l'enceinte. Mais, comme dans le cas d'une enceinte cubique, elles ont des limites de validité.

Première limite : puisque $\sqrt{\left(\frac{m_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{m_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{m_z}{L_z}\right)^2} \leq \frac{2\nu}{c}$, il est clair que ν a nécessairement une limite inférieure, qui est : $\nu_{min} = \frac{c}{2} \cdot \min\left(\frac{1}{L_x}, \frac{1}{L_y}, \frac{1}{L_z}\right)$. Et λ possède une limite supérieure : $\lambda_{max} = \frac{c}{\nu_{min}} = \frac{2}{\min\left(\frac{1}{L_x}, \frac{1}{L_y}, \frac{1}{L_z}\right)}$. Si nous ne prenons en compte que les vecteurs d'onde parallèles à l'axe z , nous pouvons écrire : $\nu_{min} = \frac{c}{2L_z} = \frac{c}{2a}$ et $\lambda_{max} = 2L_z = 2a$.

Seconde limite : commençons par une analogie. En radioastronomie, on utilise des antennes paraboliques destinées à réfléchir les ondes radio vers un capteur situé au foyer. Ces antennes ne sont pas des miroirs continus, mais des réseaux de fils très espacés, la dimension des mailles étant calculée d'après la longueur d'onde des ondes à réfléchir. Les ondes plus énergétiques (la lumière visible par exemple) "passent à travers les mailles" sans être affectées. Pour capter la lumière visible, on utilise des miroirs que nous avons l'habitude de considérer comme continus, mais qui sont en fait constitués d'atomes discrets. La distance entre ces atomes détermine les longueurs d'ondes qui vont être réfléchies. Il existe une limite inférieure λ_{min} au-dessous de laquelle les ondes traversent le miroir sans être affectées. Il existe donc aussi une limite supérieure de la fréquence : ν_{max} . De même, une enceinte fermée, destinée à modéliser un corps noir, va permettre l'établissement d'un ensemble d'ondes stationnaires, mais les ondes de fréquence trop élevée ne seront pas réfléchies, et vont traverser les parois. La courbe théorique du corps noir (version de Rayleigh et Jeans) ne sera plus suivie pour des fréquences trop élevées, pour deux raisons : d'une part les photons sont de moins en moins nombreux lorsque la fréquence augmente (voir la formule de Planck), d'autre part, à partir d'un certain seuil ($\nu > \nu_{max}$), les plaques conductrices deviennent transparentes et laissent passer les ondes virtuelles.

Insérons cette fréquence maximale dans la formule rappelée ci-dessus :

$$E = E_{(\text{fréquence} \leq \nu_{max})} = \frac{2\pi \cdot h \cdot \nu_{max}^4}{c^3} \cdot L_x \cdot L_y \cdot L_z.$$

En posant $L_x \cdot L_y = \mathcal{A}$ (aire des faces parallèles au plan xy , donc perpendiculaires à l'axe z) et $L_z = a$, l'égalité devient :

$$E = \frac{2\pi \cdot h \cdot \nu_{max}^4}{c^3} \cdot \mathcal{A} \cdot a.$$

Cette énergie est l'énergie totale de toutes les ondes stationnaires qui s'établissent durablement dans l'enceinte, ou, si on préfère, c'est une évaluation des

échanges potentiels entre les oscillateurs (atomes, électrons...) qui constituent ses parois. Nous remarquons que c'est, en pratique, une énergie finie, alors qu'en théorie la formule diverge. Ceci vient du fait que nous ne prenons pas en compte les ondes de fréquence supérieure à ν_{max} , pour lesquelles les plaques sont transparentes, et dont l'énergie totale, selon les idées de Rayleigh et Jeans, devrait être infinie. Il est permis de penser que ces ondes existent réellement, mais sont présentes aussi bien à l'extérieur de l'enceinte qu'à l'intérieur, et ne jouent donc aucun rôle dans l'établissement de forces attractives ou répulsives entre les parois. On peut penser aussi qu'il existe un coefficient qui, comme celui de Planck : $e^{-\beta.h.\nu}$, amortit les probabilités aux hautes fréquences.

Selon l'idée de Casimir, cette énergie correspond à l'énergie "intérieure", et l'énergie "extérieure" s'obtient en remplaçant a par $L - a$. On a donc :

$$E_{tot} = E_{int} + E_{ext} = \frac{2.\pi.h.\nu_{max}^4}{c^3} .\mathcal{A}.a + \frac{2.\pi.h.\nu_{max}^4}{c^3} .\mathcal{A}.(L-a) = \frac{2.\pi.h.\nu_{max}^4}{c^3} .\mathcal{A}.L.$$

Cette énergie totale ne dépend pas de a , donc on est conduit à penser qu'il va être possible de déplacer le plan de séparation ($z = a$) sans modifier le bilan énergétique, donc sans qu'aucune force ne s'y oppose. Si c'était vrai, il n'y aurait pas de force de Casimir.

Rappelons-nous aussi l'égalité suivante (voir la démonstration de la formule de Rayleigh et Jeans) :

$$dE_{(fréquence=\nu)} = \frac{8.\pi.h.\nu^3}{c^3} .L_x.L_y.L_z.d\nu.$$

Pour $\nu = \nu_{min} = \frac{c}{2.a}$, il vient :

$$dE_{(\nu=\nu_{min})} = \frac{8.\pi.h}{c^3} .\left(\frac{c}{2.a}\right)^3 .\mathcal{A}.a.d\left(\frac{c}{2.a}\right) = -\frac{\pi.h.c.\mathcal{A}}{2.a^4} .da.$$

On voit donc que pour $\nu = \nu_{min}$ (ou ν proche de ν_{min}), l'énergie "intérieure" varie fortement en fonction de a , ces variations n'étant pas compensées par l'énergie "extérieure", puisque $\frac{1}{(L-a)^4} \ll \frac{1}{a^4}$.

Ceci laisse penser qu'une force attractive entre les plaques de cote $z = 0$ et $z = a$ est possible pour $a \ll L$. Pour ν proche de ν_{min} , elle serait de l'ordre de :

$$F = \frac{dE}{da} \approx -\frac{\pi.h.c.\mathcal{A}}{2.a^4}.$$

C'est en contradiction avec le calcul précédent, qui ne prévoyait aucune force. Comment trancher ? A priori, le premier calcul semble le plus fiable, car il concerne l'ensemble des ondes stationnaires dans l'enceinte intérieure, alors que le second ne concerne que les ondes situées à la limite inférieure de fréquence. Mais le premier a le défaut de faire intervenir une intégration, ce qui suppose qu'il existe une gamme continue de fréquences possibles, alors que l'hypothèse

de départ en faisait une gamme discrète. Ce "petit" glissement aurait-il suffi à nous envoyer dans le mur ?

Les deux calculs contradictoires que nous venons de faire doivent être considérés comme deux essais infructueux. Mais avant de nous lancer dans le calcul définitif inspiré par ces deux échecs, donnons tout de suite la conclusion de Casimir. Selon son calcul, cette force attractive serait donnée par la formule :

$$F = -\frac{\pi^2}{240} \cdot \frac{\hbar \cdot c}{a^4} \cdot \mathcal{A} = -\frac{\pi \cdot \hbar \cdot c \cdot \mathcal{A}}{480 \cdot a^4}.$$

Nous remarquons une grande parenté entre cette formule et la seconde approximation, très grossière, proposée plus haut. Nous voyons aussi un coefficient bien différent : d'où vient-il ? Il est indispensable de reprendre le calcul, en contrôlant soigneusement de passage de la sommation discrète à l'intégrale, ou de l'intégrale à la sommation discrète...

Cette formule de Casimir peut choquer. On pourrait se dire : "si nous appliquons les deux plaques l'une contre l'autre, la distance a sera égale à 0, donc la force d'attraction sera infinie, et il ne sera plus possible de séparer les deux plaques." Cette idée est fautive, pour plusieurs raisons. D'abord on ne doit pas considérer la surface des plaques comme continue au sens mathématique du terme (la matière est discontinue). Ensuite, comme nous l'avons déjà dit, la validité du raisonnement de Casimir est limitée par deux bornes : ν_{min} et ν_{max} , en dehors desquelles l'établissement des ondes stationnaires entre les deux plaques est impossible.

Pour approfondir le sujet, on pourra consulter le calcul proposé par Polder et Casimir ou celui de Duplantier. Nous n'allons développer ici que l'idée qui nous semble essentielle : la subtile différence entre sommation discrète et intégrale, et nous allons présenter le calcul à notre façon, qui n'est pas la plus rapide, mais qui se veut pédagogique.

On veut étudier l'ensemble des ondes stationnaires possibles dans l'enceinte "intérieure", définie par : $0 \leq x \leq L_x$, $0 \leq y \leq L_y$, $0 \leq z \leq a$. Chaque onde stationnaire possède un vecteur d'onde \vec{k} dont les coordonnées vérifient : $k_x = \frac{\pi}{L_x} \cdot n_x$, $k_y = \frac{\pi}{L_y} \cdot n_y$, $k_z = \frac{\pi}{a} \cdot n_z$, où n_x , n_y et n_z sont des entiers relatifs non tous nuls.

On peut tout de suite remarquer qu'il existe, à priori, une infinité d'ondes stationnaires possibles. Ceci ne signifie pas qu'il existe une infinité d'ondes réelles ! On raisonne sur des "possibilités", pas sur des réalités ! De plus, on néglige le fait que l'éventail de fréquence des ondes possibles, comme on l'a vu, est limité aussi bien supérieurement qu'inférieurement. On raisonne comme s'il existait une infinité d'oscillateurs, tout en sachant qu'il n'existe qu'un nombre fini d'atomes (ou d'électrons) capables d'osciller.

Nous avons vu que :

$$\|\vec{k}\| = \frac{\omega}{c} = \frac{2 \cdot \pi \cdot \nu}{c} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}.$$

Pour chaque onde stationnaire (autrement dit : pour chaque mode vibratoire autorisé, ou pour chaque vecteur d'onde \vec{k}) il existe une énergie de point zéro définie par :

$$\begin{aligned} \frac{h \cdot \nu_{\vec{k}}}{2} &= \frac{h \cdot c}{4 \cdot \pi} \cdot \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{\hbar \cdot c}{2} \cdot \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} ; \\ \frac{h \cdot \nu_{\vec{k}}}{2} &= \frac{h \cdot c}{4 \cdot \pi} \cdot \sqrt{\left(\frac{\pi}{L} \cdot n_x\right)^2 + \left(\frac{\pi}{L} \cdot n_y\right)^2 + \left(\frac{\pi}{a} \cdot n_z\right)^2} ; \\ \frac{h \cdot \nu_{\vec{k}}}{2} &= \frac{h \cdot c}{4} \cdot \sqrt{\left(\frac{n_x}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{a}\right)^2} . \\ \nu_{\vec{k}} &= \frac{c}{2} \cdot \sqrt{\left(\frac{n_x}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{a}\right)^2} . \end{aligned}$$

Dans cette égalité, $\nu_{\vec{k}}$ désigne la fréquence de l'onde stationnaire associée au vecteur d'onde \vec{k} , donc aux nombres n_x , n_y , n_z .

Mais le but est de prendre en compte tous les vecteurs \vec{k} possibles, et d'additionner les énergies de point zéro correspondantes. On voudrait donc calculer :

$$\begin{aligned} \sum \frac{h \cdot \nu_{\vec{k}}}{2} &= \sum_{n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}} \frac{h \cdot c}{4} \cdot \sqrt{\left(\frac{n_x}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{a}\right)^2} ; \\ \sum \frac{h \cdot \nu_{\vec{k}}}{2} &= \frac{h \cdot c}{4 \cdot \pi} \cdot \sum_{n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}} \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} . \end{aligned}$$

Maintenant, appelons ν une fréquence fixée, et intéressons-nous aux ondes stationnaires de fréquence $\nu_{\vec{k}}$ inférieure à ν :

$$\begin{aligned} \nu_{\vec{k}} &\leq \nu ; \\ \frac{c}{2} \cdot \sqrt{\left(\frac{n_x}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{a}\right)^2} &\leq \nu ; \\ \frac{c}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} &\leq \nu ; \\ \|\vec{k}\| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} &\leq \frac{2 \cdot \pi \cdot \nu}{c} = \frac{\omega}{c} . \end{aligned}$$

Pour comptabiliser les ondes de fréquence $\nu_{\vec{k}}$ inférieure à ν , nous pouvons tenter un dénombrement basé sur les nombres entiers n_x , n_y , n_z (dénombrement discret) ou bien considérer les composantes du vecteur d'onde k_x , k_y , k_z comme

des nombres réels pouvant varier de manière continue, et procéder par intégration. Nous allons commencer par la seconde méthode : celle de l'intégration.

Pour faciliter la compréhension, imaginons, dans l'espace tridimensionnel usuel, les points de coordonnées (x, y, z) tels que $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = r \leq R$, et calculons :

$$A = \iiint \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.dx.dy.dz = \iiint r.dx.dy.dz,$$

dans laquelle l'intégration se fait sur toutes les valeurs de x, y, z telles que $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = r \leq R$.

Pour se fixer les idées, on pourra imaginer une boule matérielle de rayon R , avec une densité croissante du centre jusqu'à la surface, proportionnellement à la distance au centre r . Le but est de calculer la masse totale. On peut s'y prendre de deux façons.

La première (la plus simple) consiste à décomposer la boule en couches sphériques de rayon r (donc d'aire $4.\pi.r^2$), auxquelles on attribue une épaisseur dr ; leur volume est égal à $4.\pi.r^2.dr$ et leur masse à $4.\pi.r^3.dr$. On obtient :

$$A = \iiint r.dx.dy.dz = \int_{r=0}^R 4.\pi.r^3.dr = [\pi.r^4]_{r=0}^R = \pi.R^4.$$

La seconde consiste à découper la boule en tranches parallèles au plan xy , chaque tranche étant caractérisée par sa cote z ($-R \leq z \leq R$) et son rayon $\sqrt{R^2 - z^2}$; son épaisseur est dz . Chaque tranche est décomposée à son tour en couronnes concentriques de rayon $u = \sqrt{r^2 - z^2}$ ($0 \leq u \leq \sqrt{R^2 - z^2}$), de largeur du , d'épaisseur dz , donc de volume $2.\pi.u.du.dz$, et de masse $2.\pi.r.u.du.dz = 2.\pi.\sqrt{u^2 + z^2}.u.du.dz$. On intègre sur u , puis sur z .

$$A = \int_{z=-R}^R \int_{u=0}^{\sqrt{R^2-z^2}} 2.\pi.\sqrt{u^2 + z^2}.u.du.dz ;$$

ou, en posant $v = u^2 = r^2 - z^2$:

$$A = 2. \int_{z=-R}^R \int_{v=0}^{R^2-z^2} \pi.\sqrt{v + z^2}.dv.dz = 2. \int_{z=0}^R \int_{v=0}^{R^2-z^2} \pi.(v + z^2)^{\frac{1}{2}}.dv.dz ;$$

ou encore, en posant $w = (v + z^2)^{\frac{3}{2}}$, et, par conséquent : $dw = \frac{3}{2}.(v + z^2)^{\frac{1}{2}}.dv$:

$$A = \int_{z=0}^R \int_{w=z^3}^{R^3} \frac{4.\pi}{3}.dw.dz = \frac{4.\pi}{3}. \int_{z=0}^R (R^3 - z^3).dz ;$$

$$A = \frac{4.\pi.R^3}{3}. \int_{z=0}^R \left(1 - \frac{z^3}{R^3}\right).dz;$$

$$A = \frac{4.\pi.R^3}{3} \cdot \left[z - \frac{z^4}{4.R^3} \right]_{z=0}^R = \frac{4.\pi.R^3}{3} \cdot \left(R - \frac{R}{4} \right) = \pi.R^4.$$

On retrouve, bien sûr, le même résultat que par la première méthode.

Attention : nous venons de raisonner sur un problème de géométrie concret, dans le cadre de la physique classique la plus élémentaire, alors que dans l'effet Casimir on doit raisonner dans l'espace virtuel des vecteurs d'onde ; il faut remettre le résultat dans son contexte, en remplaçant x, y, z par k_x, k_y, k_z et R par $\frac{\omega}{c} = \frac{2.\pi.\nu}{c}$; l'égalité ci-dessus devient :

$$A = \iiint_{\nu_{\vec{k}} \leq \nu} \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} . dk_x . dk_y . dk_z = \pi.R^4 = \pi \cdot \left(\frac{2.\pi.\nu}{c} \right)^4.$$

Mais reprenons le calcul à l'étape précédente (que nous avons mise en valeur, ci-dessus, en rouge), car c'est le point de bifurcation entre deux directions possibles.

Tout d'abord, faisons une première correction : nous avons fait deux intégrations, par rapport à x (traduisons par k_x) et y (traduisons par k_y) ; or, dans ce contexte, nous aurions dû intégrer par rapport à n_x et n_y , car c'est le nombre d'états vibratoires qui doit intervenir dans le calcul probabiliste ; nous savons que $k_x = \frac{\pi}{L}.n_x$ et $k_y = \frac{\pi}{L}.n_y$; la première correction consiste donc à diviser A par $\left(\frac{\pi}{L}\right)^2$.

Seconde correction : nous raisonnons ici sur des ondes stationnaires, qui sont non-orientées selon les axes x, y et z ; donc les signes de n_x, n_y et n_z sont indifférents : on doit considérer qu'il s'agit de nombres positifs, et non relatifs ; il en résulte que le nombre de modes vibratoires doit être divisé par 8.

Troisième correction : il faut prendre en compte la polarisation des ondes stationnaires, ce qui nous conduit à multiplier par 2 le nombre de modes vibratoires.

Après corrections, on obtient :

$$A' = \left(\frac{L}{\pi}\right)^2 \cdot \frac{2}{8} \cdot A = \left(\frac{L}{\pi}\right)^2 \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{4.\pi.R^3}{3} \cdot \int_{z=0}^R \left(1 - \frac{z^3}{R^3}\right) . dz ;$$

$$A' = \frac{L^2.R^3}{3.\pi} \cdot \int_{z=0}^R \left(1 - \frac{z^3}{R^3}\right) . dz.$$

A partir d'ici, envisageons l'autre option, dans laquelle z (ou k_z) ne varie pas continûment, et ne peut prendre que des valeurs discrètes : $z = n \cdot \frac{\pi}{a}$ ($0 \leq n \leq N$), ou, si on préfère (en posant $R = \frac{\omega}{c} = N \cdot \frac{\pi}{a}$) : $z = \frac{n}{N} \cdot R$.

Reprenons donc la fin du calcul de A' , avant l'intégration sur z , et remplaçons cette intégration par la somme discrète suivante :

$$B = \frac{L^2.R^3}{3.\pi} \cdot \sum_{n=0}^N \left(1 - \frac{z^3}{R^3}\right) = \frac{L^2.R^3}{3.\pi} \cdot \sum_{n=0}^N \left(1 - \frac{n^3}{N^3}\right) ;$$

$$B = \frac{L^2.R^3}{3.\pi} \cdot \left(N + 1 - \frac{1}{N^3} \cdot \sum_{n=0}^N n^3\right).$$

La formule donnant la somme des cubes est connue (grâce à Euler et Mac Laurin, précisément) :

$$\sum_{n=0}^N n^3 = \left(\frac{N.(N+1)}{2}\right)^2 = \frac{N^4 + 2.N^3 + N^2}{4}.$$

On en déduit :

$$B = \frac{L^2.R^3}{3.\pi} \cdot \left(N + 1 - \frac{N^4 + 2.N^3 + N^2}{4.N^3}\right) ;$$

$$B = \frac{L^2.R^3}{3.\pi} \cdot \left(N + 1 - \frac{N}{4} - \frac{1}{2} - \frac{1}{4.N}\right) = \frac{L^2.R^3}{3.\pi} \cdot \left(\frac{3.N}{4} + \frac{1}{2} - \frac{1}{4.N}\right).$$

Considérons la fonction f définie par :

$$f(n) = 1 - \frac{n^3}{N^3}.$$

On va avoir besoin de ses dérivées successives :

$$f'(n) = -\frac{3.n^2}{N^3}, \quad f''(n) = -\frac{6.n}{N^3}, \quad f'''(n) = -\frac{6}{N^3}, \quad f''''(n) = f''''''(n) = \dots = 0.$$

Une idée très subtile de Casimir est d'utiliser la formule d'Euler-Mac Laurin, qui concerne les fonctions infiniment dérivables :

$$\sum_{n=0}^N f(n) = \int_{n=0}^N f(n).dn + \frac{f(0) + f(N)}{2} + \frac{1}{6} \cdot \frac{f'(N) - f'(0)}{2} - \frac{1}{30} \cdot \frac{f'''(N) - f'''(0)}{24} + \dots$$

Pour la fonction f définie ci-dessus, on a :

$$\sum_{n=0}^N f(n) = \sum_{n=0}^N \left(1 - \frac{n^3}{N^3}\right) = \frac{3.N}{4} + \frac{1}{2} - \frac{1}{4.N} \quad (\text{voir calcul ci-dessus}) ;$$

$$\int_{n=0}^N f(n).dn = \int_{n=0}^N \left(1 - \frac{n^3}{N^3}\right).dn = \left[n - \frac{n^4}{4.N^3}\right]_{n=0}^N = N - \frac{N}{4} = \frac{3.N}{4} ;$$

$$\frac{f(0) + f(N)}{2} = \frac{1+0}{2} = \frac{1}{2} ;$$

$$\frac{1}{6} \cdot \frac{f'(N) - f'(0)}{2} = \frac{1}{6} \cdot \frac{-\frac{3}{N} - 0}{2} = -\frac{1}{4.N};$$

$$\frac{1}{30} \cdot \frac{f'''(N) - f'''(0)}{24} = \frac{1}{30} \cdot \frac{-\frac{6}{N^3} + \frac{6}{N^3}}{24} = 0.$$

Si on calcule les deux membres de la formule d'Euler-Mac Laurin pour la fonction f , on obtient :

$$\frac{3.N}{4} + \frac{1}{2} - \frac{1}{4.N} = \frac{3.N}{4} + \frac{1}{2} - \frac{1}{4.N}.$$

L'égalité est trivialement vérifiée; ce qui ne nous apprend rien! On remarque que $\frac{1}{2} - \frac{1}{4.N}$ représente la différence entre la somme discrète et l'intégrale de la fonction f .

Il est d'usage (et physiquement justifié) d'inclure le terme $\frac{f(0)}{2}$ (ici : $\frac{1}{2}$) dans la somme discrète; ceci signifie que le terme de rang 0 est comptabilisé avec le coefficient $\frac{1}{2}$. On écrit alors :

$$\sum_{n=(0)1}^N f(n) = \frac{1}{2} \cdot f(0) + \sum_{n=1}^N f(n) = \sum_{n=0}^N f(n) - \frac{1}{2} \cdot f(0) \quad (\text{notation de Casimir})$$

ou bien :

$$\sum_{n=0}^{N'} f(n) = \frac{1}{2} \cdot f(0) + \sum_{n=1}^N f(n) = \sum_{n=0}^N f(n) - \frac{1}{2} \cdot f(0) \quad (\text{notation de Duplantier}).$$

En multipliant ses deux membres par $\frac{L^2.R^3}{3\pi}$, on voit que :

$$B = A' - \frac{L^2.R^3}{3\pi} \cdot \frac{1}{4.N}.$$

Quand N tend vers l'infini, la différence entre B (somme discrète) et A' (l'intégrale) tend vers 0. On pourrait en conclure que la force de Casimir n'existe pas! Nous avons fait tous ces calculs pour rien!

Mais une réflexion plus poussée montre qu'il y a un problème : nous avons vu que les ondes stationnaires ne peuvent pas s'établir (ou plus difficilement) au-delà d'une fréquence limite, donc au-delà d'une valeur maximale de N ; on peut raisonnablement penser que la fonction f qui apparaît dans nos calculs est de moins en moins pertinente à l'approche de cette limite. Nous devons la corriger, de telle sorte que $f(N)$, $f'(N)$, $f''(N)$, $f'''(N)$, etc., s'annulent (ou tendent vers 0) pour N suffisamment grand. Donc, pour N suffisamment grand, la formule d'Euler-Mac Laurin devrait pouvoir se simplifier de la manière suivante :

$$\sum_{n=0}^N f(n) \approx \int_{n=0}^N f(n).dn + \frac{f(0)}{2} - \frac{1}{6} \cdot \frac{f'(0)}{2} + \frac{1}{30} \cdot \frac{f'''(0)}{24} + \dots$$

Si nous conservons les valeurs de f et de ses dérivées au voisinage de 0 : $f(0) = \frac{1}{2}$, $f'(0) = 0$, $f''(0) = 0$, $f'''(0) = -\frac{6}{N^3}$, nous obtenons :

$$\sum_{n=0}^N f(n) = \int_{n=0}^N f(n).dn + \frac{f(0)}{2} - \frac{1}{30} \cdot \frac{6}{24.N^3} ;$$

$$\sum_{n=(0)1}^N f(n) = \int_{n=0}^N f(n).dn - \frac{1}{120.N^3} ;$$

et, en multipliant par $\frac{L^2.R^3}{3\pi}$:

$$B' = A' - \frac{L^2.R^3}{3\pi} \cdot \frac{1}{120.N^3} ;$$

$$A' - B' = \frac{L^2}{3\pi} \cdot \left(N \cdot \frac{\pi}{a}\right)^3 \cdot \frac{1}{120.N^3} = \frac{L^2.\pi^2}{360.a^3}.$$

La notation B' indique que la somme B a été corrigée, puisque la fonction f sur laquelle elle se base a elle-même été corrigée.

Cette fois-ci, la différence $A' - B'$ ne tend plus vers 0 quand N tend vers l'infini : il y a un écart irréductible ! C'est lui qui est à l'origine de l'effet Casimir. Il correspond à un déficit d'énergie entre les plaques. Ce déficit est lié au fait qu'entre ces plaques les ondes stationnaires, selon la direction z , sont contraintes. Les ondes parallèles au plan xy ne sont pas contraintes, pas plus que les ondes de direction quelconque qui circulent dans l'espace extérieur : mathématiquement, elles se traitent comme des quantités continues, grâce à des intégrales. Entre les plaques, les ondes sont contraintes, obligées de s'organiser selon un ordre discret, qui se traite à l'aide de sommes discrètes.

On peut remarquer aussi que N ne figure pas dans cette formule ; on lui impose seulement d'être assez grand pour que $f(N)$, $f'(N)$, $f''(N)$, ..., puissent être considérés comme (presque) nuls. On peut penser que ceci se produit pour $R \geq \frac{\omega_{max}}{c} = \frac{2.\pi.\nu_{max}}{c} = N_{max} \cdot \frac{\pi}{a}$, donc $N \geq N_{max} = \frac{2.a.\nu_{max}}{c} = \frac{2.a}{\lambda_{min}}$.

Comme on l'a vu, il reste à multiplier par $\frac{h.c}{4.\pi}$ pour obtenir la somme de tous les déficits d'énergie de point zéro des oscillations concernées :

$$\Delta E \approx \frac{h.c}{4.\pi} \cdot \frac{L^2.\pi^2}{360.a^3} = \frac{\pi.h.c.L^2}{1440.a^3}.$$

La densité d'énergie est plus faible entre les plaques que dans l'espace extérieur. Mathématiquement, ce déficit semble tendre vers l'infini quand a (la distance entre les plaques) tend vers 0, et il tend vers 0 quand a tend vers l'infini. Il faut donc fournir de l'énergie si on veut écarter les plaques l'une de l'autre ; on doit alors lutter contre une force, qui se calcule ainsi :

$$F = \frac{d(\Delta E)}{da} = \frac{\pi.h.c.L^2}{1440} \cdot \frac{d(a^{-3})}{da} = \frac{\pi.h.c.L^2}{1440} \cdot \frac{-3}{a^4} = -\frac{\pi.h.c.L^2}{480.a^4},$$

ou, en notant $\mathcal{A} = L^2$ l'aire des plaques :

$$F = -\frac{\pi \cdot h \cdot c \cdot \mathcal{A}}{480 \cdot a^4}.$$

Cette force d'attraction est la force de Casimir.

Ce raisonnement est évidemment un peu "acrobatique" : on a souhaité corriger la fonction f pour les hautes fréquences, mais pas pour les basses fréquences. Du point de vue du physicien, c'est parfaitement justifié, car on étudie ici une situation d'équilibre, et en physique les équilibres sont modélisés par des fonctions (infiniment) dérivables; du point de vue du mathématicien, c'est plus délicat, parce-qu'une fonction infiniment dérivable est un tout qu'on ne peut pas modifier loin de l'origine sans la modifier aussi à l'origine. Une façon autorisée est de la multiplier ou de la composer avec une autre fonction infiniment dérivable. Mais laquelle? Est-ce, par exemple, une fonction exponentielle décroissante, comme $e^{-h \cdot \nu}$? Dans le cas des échanges thermiques, Planck nous a donné une réponse non ambiguë; mais, concernant l'énergie du point zéro, Casimir ne nous la donne pas; son astuce est de montrer que la connaissance précise de cette fonction n'est pas nécessaire à la démonstration de l'existence d'une force attractive entre les deux plaques.

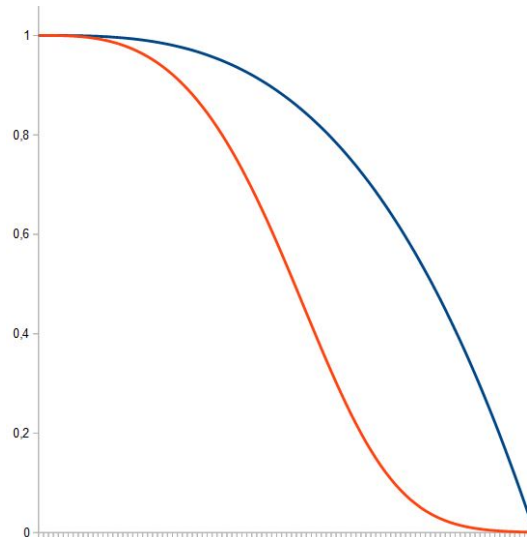
Posons $x = \frac{n}{N}$. Nous avons représenté ci-dessous (en bleu) la fonction :

$$f_1(x) = 1 - x^3 = 1 - \frac{n^3}{N^3},$$

et (en rouge) une fonction f_2 corrigée selon le principe ci-dessus. Pour tracer cette seconde courbe, nous avons choisi arbitrairement l'exemple suivant :

$$f_2(x) = 1 - th(4 \cdot x^3) = 1 - th \frac{4 \cdot n^3}{N^3}.$$

Dans la première courbe (bleue), on considère que $f(x) = f_1(x) = 1 - x^3$; n ne peut pas dépasser la limite théorique N_{max} ; on doit donc avoir : $\frac{n}{N_{max}} \leq 1$, donc $x \leq 1$; la partie de la courbe située au-dessous de l'axe des abscisses (non figurée ici) n'a pas de signification physique. L'effet de réflexion des ondes (donc l'établissement d'ondes stationnaires) s'arrête brutalement pour $n = N_{max}$ (donc pour $x = 1$). Pour $x = 1$ (ou $n = N_{max}$), ses dérivées ne s'annulent pas.



Dans la seconde courbe (rouge), on considère que $f(x) = f_2(x)$; l'effet de réflexion des ondes ne cesse pas instantanément pour $n = N_{max}$, mais s'atténue progressivement. On peut supposer que les oscillateurs situés dans les deux plaques (électrons?) changent continuellement de fréquence, et que les ondes résultantes traduisent un état d'équilibre. Pour $n = N_{max}$ (donc pour $x = 1$), la fonction est à peu près nulle, ainsi que toutes ses dérivées. Mais il n'est pas interdit d'imaginer que la limite théorique N_{max} puisse être occasionnellement dépassée (penser à l'effet tunnel) et que la courbe puisse se prolonger (de manière résiduelle) pour $x > 1$ ($n > N_{max}$).

Mais la principale question soulevée par l'effet Casimir est celle-ci : de quoi parle-t-on ?

Dans l'étude du corps noir, les ondes stationnaires qui s'établissent dans l'enceinte sont censées modéliser la façon dont les oscillateurs (c'est-à-dire les atomes ou électrons situés dans les parois) se transmettent à distance de l'énergie-impulsion, ou, si on préfère, de l'agitation thermique, et le but est de déterminer l'équilibre qui en résulte. Dans l'effet Casimir, on étudie en quelque sorte une situation limite : si on fait tendre la température vers le zéro absolu, l'agitation des oscillateurs ne tend pas vers zéro, puisqu'il reste toujours une "énergie du point zéro". C'est l'ensemble des échanges basés sur cette énergie du point zéro qui a été étudié par Casimir.

Certains physiciens présentent l'énergie du point zéro comme une "énergie du vide". Ce n'est pas complètement faux, en ce sens que l'énergie-impulsion des oscillateurs (atomes, électrons) est une énergie vibratoire qu'on peut considérer comme délocalisée : connaissant avec précision l'énergie d'un oscillateur, il est impossible de connaître précisément sa localisation, d'après le principe

d'incertitude. Il est donc permis, pour se fixer les idées, d'imaginer cette énergie diluée dans l'espace occupé par les ondes. Mais on ne doit pas en déduire que cette énergie est indépendante de la présence de matière. On ne doit pas croire que, si toute la matière disparaissait, il resterait l'énergie du vide. L'énergie du point zéro est bien l'énergie de la matière, même si on ne sait pas où elle se trouve! C'est en quelque sorte une énergie de liaison : les plaques sont liées par les échanges qui s'établissent entre elles.

De plus, si on choisit d'imaginer cette énergie diluée dans tout l'espace occupé par une onde, alors il faut bien convenir qu'il ne peut pas s'agir d'une énergie réelle, mais seulement d'une énergie virtuelle, plus précisément d'une information qui peut sauter à tout instant d'un atome à un autre ; c'est seulement au moment de l'échange qu'on peut parler d'une énergie réelle : à cet instant, elle se manifeste sous forme d'un transfert d'énergie-impulsion entre deux structures matérielles (par exemple deux atomes), et l'onde est "immédiatement" vidée de la totalité de son contenu, qui était donc virtuel, comme ces "avatars" rencontrés dans les expériences de physique quantique, et qui peuvent, selon la situation, être "élus" ou "rejetés dans le néant". Le vide n'est que le support des ondes, et les ondes sont le mode de communication entre les structures matérielles ; ce mode de communication étant à la fois ondulatoire et quantifié. En l'absence de ces structures, le vide ne possède aucune énergie propre.

Si l'énergie des ondes stationnaires qui s'établissent entre les deux plaques est une énergie électromagnétique associée à la vibration des atomes (ou électrons) de ces plaques - une énergie en perpétuel transfert - alors qu'en est-il des ondes situées à l'extérieur ? On doit admettre qu'il y a aussi, continuellement, des échanges qui ont lieu entre les plaques et le monde extérieur : avec le sol, les murs du laboratoire, le corps du technicien, l'atmosphère terrestre, les astres...

Les études du rayonnement du corps noir et de l'effet Casimir montrent clairement le rôle déterminant des ondes stationnaires dans les échanges d'énergie électromagnétique entre atomes. En l'occurrence, nous sommes dans le cas où chaque atome (de l'enceinte, ou des plaques conductrices) est à la fois source et cible, émetteur et récepteur. Ceci nous renvoie à la théorie (aujourd'hui abandonnée) des ondes-pilotes, selon laquelle ces échanges seraient des transferts de photons (considérés comme des particules), pilotés par ces ondes. Cette théorie est très intéressante, dans la mesure où elle donne un rôle central aux ondes. Mais elle donne encore trop de place aux particules : comme nous l'avons vu, le photon, considéré comme une particule ponctuelle se déplaçant sur une trajectoire bien déterminée, n'existe pas. Ce sont les ondes qui s'expriment par des transferts quantifiés. La quantification n'est pas une propriété des particules : c'est une propriété des ondes. On s'en rend bien compte quand on étudie le modèle de l'atome, dans lequel les orbites des électrons correspondent à des ondes stationnaires ; des ondes également quantifiées, d'une autre façon, sont la clé du rayonnement du corps noir comme de l'effet Casimir.

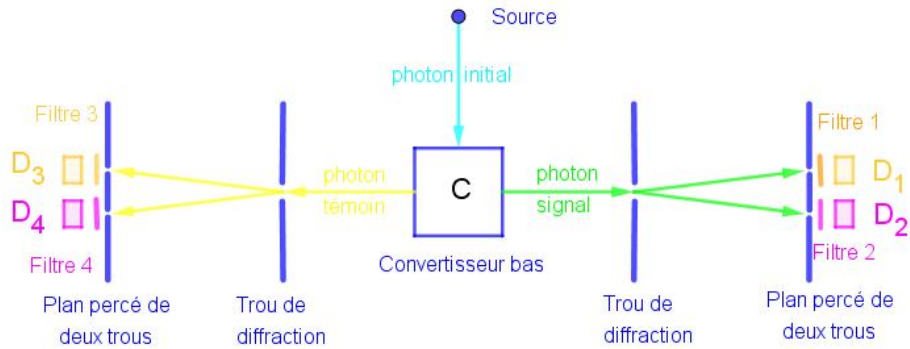
La principale différence entre l'étude du rayonnement du corps noir et l'étude de l'effet Casimir, c'est que dans la première on raisonne comme si chaque oscillateur (atome, électron) possédait à chaque instant un mode d'oscillation bien déterminé, avec une énergie fixée. Mais nous devons nous représenter ces oscillateurs sur le modèle des atomes de Rydberg manipulés par Serge Haroche : chacun se trouve simultanément dans une superposition d'états. C'est la raison pour laquelle l'énergie d'un oscillateur ne peut à aucun moment être considérée comme totalement nulle. En prenant en compte cette superposition d'états, donc l'"incertitude" au sens d'Heisenberg, l'effet Casimir apporte une correction nécessaire à l'étude du corps noir.

Remarquons encore une chose qui peut sembler étrange : le calcul de la force de Casimir ne fait pas intervenir la nature physique des plaques, leur épaisseur, leur masse ; il suffit qu'elles soient "parfaitement conductrices". Cette seule condition impose aux ondes électromagnétiques de point zéro qui circulent entre les plaques (et qui correspondent à des "échanges minimaux") de s'organiser selon un ordre qui diffère du désordre extérieur, et c'est cette différence qui explique l'effet Casimir.

19 Polarisation, inégalité de Bell

Reprenons la quatrième expérience décrite dans la section "Quelques expériences classiques" et simplifions-la : supprimons la gomme quantique, et traitons de manière identique le photon signal et le photon témoin, pour bien faire apparaître leurs rôles symétriques. Ne cherchons plus à produire des interférences ; plaçons simplement des détecteurs derrière les filtres polarisants, placés eux-même derrière deux trous percés dans un plan opaque.

Le photon témoin et le photon signal sont intriqués en polarisation : si une mesure de la polarisation de l'un d'eux donne "polarisation 1" (disons verticale), alors la mesure de la polarisation du second donnera nécessairement "polarisation 2" (horizontale), et réciproquement. Pour mesurer ces polarisations, on fait donc passer les deux photons par deux trous (dispositif de Young). Pour le photon signal, on a placé le filtre 1 (qui sélectionne la polarisation 1), suivi du détecteur D_1 , à la sortie de l'un des trous, et le filtre 2 (qui sélectionne la polarisation 2), suivi du détecteur D_2 , à la sortie de l'autre trou. Pour le photon témoin, c'est le filtre 3 qui sélectionne la polarisation 1, et le filtre 4 qui sélectionne la polarisation 2.



Supposons par exemple que le photon signal soit détecté en D_1 (polarisation 1). Le photon témoin doit alors avoir la polarisation 2, ce qui veut dire qu'il doit sortir en D_4 . On peut avoir l'impression qu'en sortant en D_1 , le photon signal "oblige" le photon témoin à sortir en D_4 . Mais n'oublions pas que les rôles des deux photons sont symétriques : on pourrait dire qu'en sortant en D_4 , c'est le photon témoin qui "oblige" le photon signal à sortir en D_1 ! Disons plutôt que les deux événements sont corrélés.

Remarquons bien que le fait que le parcours du photon témoin soit plus long, ou plus court, que celui du photon signal, ne change strictement rien.

Le plus étonnant n'est pas que les polarités des deux photons soient corrélées, mais que leurs parcours (passage par le trou du haut ou celui du bas) soient corrélés aussi. Mais, après tout, la position n'est qu'une "observable" parmi d'autres.

Essayons de donner une explication aussi cohérente que possible (mais qui pourrait bien se révéler fautive, comme on le verra ensuite) de cette expérience.

Le faisceau initial, arrivé dans le convertisseur bas, donne naissance aux deux faisceaux (signal et témoin) intriqués en polarisation. A priori, ces deux faisceaux ne sont pas polarisés, ou plutôt ils ont chacun une polarisation instantanée qui peut varier dans le temps et/ou dans l'espace, ces deux polarisations étant complémentaires.

Mais n'oublions pas que la polarisation instantanée du faisceau signal ne change pas entre l'émission et la réception, et celle du faisceau témoin est la polarisation complémentaire.

Le faisceau signal est partagé en deux sous-faisceaux ; chacun d'eux passe par l'un des trous du dispositif de Young, et traverse un filtre polarisant ; une fraction du faisceau est absorbée, une autre est transmise ; on peut calculer les proportions selon la loi de Malus. La composante de polarisation 1 est transmise

par le filtre 1, la composante de polarisation 2 est transmise par le filtre 2.

Dans le faisceau témoin, la composante 1 équivaut à la composante 2 du faisceau signal, et passe par le filtre 4; la composante 2 équivaut à la composante 1 du faisceau signal, et passe par le filtre 3.

Les difficultés apparaissent lorsqu'on émet un seul photon à la fois. Dans ce cas, calculer la "proportion du photon" qui va passer par l'un ou l'autre trou n'a pas de sens : il va être détecté par l'un des détecteurs ou par l'autre, mais certainement pas "en partie par chacun d'eux". Selon l'interprétation usuelle de la physique quantique, on dit qu'il y a un choix qui s'effectue selon une règle probabiliste. La probabilité de détecter le photon signal en D_1 est égale à la probabilité de détecter le photon témoin en D_4 , mais il ne s'agit que de probabilités ! Quand on fait un tirage à pile ou face, il y a une chance sur deux que la pièce tombe du côté pile et une chance sur deux qu'elle tombe du côté face. Si on fait simultanément deux tirages à des centaines de kilomètres de distance, les probabilités, pour les deux pièces, sont identiques ; mais, sachant que la première pièce est tombée du côté pile, on ne peut pas en déduire que l'autre soit tombée aussi du côté pile. Deux "choix" indépendants se sont produits, dans le cadre général de la théorie des probabilités. Mais imaginons qu'un atome de Calcium émette dans des directions opposées deux photons intriqués, de polarisations complémentaires (perpendiculaires) ; ils sont réceptionnés par deux filtres polarisants ayant des axes parallèles. Dans ce cas, l'expérience montre que si l'un des photons est transmis, l'autre est automatiquement absorbé, et inversement. Il n'y a pas deux "choix", mais un seul ! C'est le propre de l'intrication.

On a l'habitude de dire que ce sont les photons (ondes ou particules) qui sont intriqués, mais il serait plus juste de dire que ce sont les deux "choix" (événements) qui n'en font qu'un.

Pour examiner ces problèmes, reprenons les bases de l'étude de la polarisation.

Lorsqu'un rayon de lumière non polarisée traverse la lame d'un filtre polarisant, la moitié de son énergie est absorbée, et l'autre moitié ressort sous forme de lumière polarisée parallèlement à l'axe du polariseur (direction privilégiée associée à ce polariseur). Le faisceau a laissé dans le polariseur la moitié de son énergie.

Remarquons que ce phénomène est irréversible : si, mentalement, on arrête, puis inverse le cours du temps, pour renvoyer le faisceau sortant (polarisé) vers le polariseur, il ne va certainement pas récupérer l'énergie qu'il y a laissée ! Celle-ci, entre temps, a été transmise, de proche en proche, dans la structure moléculaire du polariseur, et n'est plus disponible ; elle a été récupérée par le "monde macroscopique", ou "monde de la complexité". Ceci distingue radicalement le rôle du polariseur de celui d'un miroir semi-réfléchissant, par exemple : ce miroir

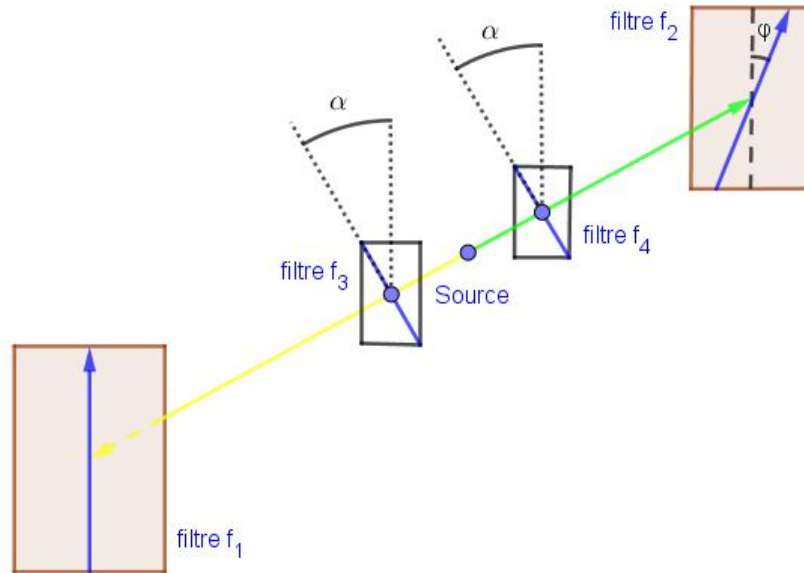
sépare le faisceau en deux "avatars" dont aucun n'est absorbé; les deux restent disponibles dans le cadre fermé du système étudié; le polariseur, au contraire, laisse échapper une partie de l'information vers le monde extérieur; le système étudié n'est plus un système fermé; il y a eu un véritable événement (une catastrophe) avec fuite d'information et d'énergie.

Comment sait-on que le faisceau sortant est polarisé? Tout simplement en le faisant passer dans un autre polariseur : si l'axe du second polariseur est parallèle à celui du premier, le faisceau n'est pas affecté; mais si l'axe du second polariseur est perpendiculaire à celui du premier, le faisceau est totalement absorbé. On peut calculer la proportion d'énergie transmise en fonction de l'angle ϕ formé par les axes des deux polariseurs; elle est égale à $\cos^2\phi$. C'est la loi de Malus.

En physique classique, on interprète ceci en imaginant qu'un rayonnement de lumière polarisée "vibre" dans un plan déterminé; cette vibration peut être représentée par une direction perpendiculaire au vecteur vitesse. Un filtre polarisant ne laisse passer que la composante parallèle à son axe (ce qui revient, mathématiquement, à projeter la direction de polarisation sur l'axe du polariseur).

Essayons d'appliquer ces idées simples (issues de la physique classique) à une expérience de pensée également simple, mais dans laquelle les photons sont considérés individuellement. Nous allons supposer que chaque photon ("photon polarisé") possède une direction de polarisation perpendiculaire à sa vitesse. Nous allons donc faire une tentative pour transposer à l'échelle des photons individuels ce que la physique classique a établi au niveau des faisceaux lumineux, constitués - on le suppose - d'une multitude de photons.

On considère deux filtres polarisants f_1 et f_2 (deux lames parallèles) dont les axes de polarisation forment entre eux un angle égal à ϕ . Ils sont disposés de part et d'autre de la source S (dans des directions opposées). A partir de cette source, nous envoyons des "photons polarisés" (ayant tous la même polarisation) en direction de ces deux polariseurs. Ces photons ont une direction de polarisation qui fait un angle α avec l'axe du premier polariseur, et un angle $\alpha + \phi$ avec l'axe du second polariseur.



La source va donc émettre deux photons en directions opposées, l'un vers f_1 , l'autre vers f_2 . Pour s'assurer que ces photons aient la même polarisation, on les fait passer préalablement, au sortir de la source, par deux filtres f_3 et f_4 d'axes parallèles (mais on peut, si on le désire, faire tourner, par exemple, le filtre f_4 de 90° , pour obtenir des polarisations perpendiculaires); on aura ainsi la maîtrise de la polarisation de chacun d'eux. Mais ces photons ne sont pas intriqués : ils sont indépendants; il n'est même pas nécessaire qu'ils soient émis simultanément. La probabilité que le premier photon soit transmis par le filtre f_1 est égale à $\cos^2\alpha$, et la probabilité qu'il soit absorbé est égale à $\sin^2\alpha$. La probabilité que le second photon soit transmis par le filtre f_2 est égale à $\cos^2(\alpha + \phi)$, et la probabilité qu'il soit absorbé est égale à $\sin^2(\alpha + \phi)$. Nous avons utilisé deux fois la loi de Malus, sous sa version probabiliste.

Si les deux "choix" se font de manière indépendante, alors la probabilité que les deux photons soient tous les deux transmis est $\cos^2\alpha \cdot \cos^2(\alpha + \phi)$, et la probabilité qu'ils soient tous les deux absorbés est $\sin^2\alpha \cdot \sin^2(\alpha + \phi)$.

On place des détecteurs derrière les deux filtres. Pour chaque paire de photons émis par la source, on note le résultat sous la forme (+, +) si les deux photons ont été transmis, (+, -) si le premier a été transmis et le second absorbé, (-, +) si le premier a été absorbé et le second transmis, (-, -) s'ils ont été tous les deux absorbés.

On dira qu'il y a coïncidence si les photons sont tous les deux transmis ou tous les deux absorbés : (+, +) ou (-, -).

La probabilité d'obtenir une coïncidence est :

$$P(\phi, \alpha) = \cos^2\alpha.\cos^2(\alpha + \phi) + \sin^2\alpha.\sin^2(\alpha + \phi) ;$$

$$P(\phi, \alpha) = \cos^2\alpha.(\cos\alpha.\cos\phi - \sin\alpha.\sin\phi)^2 + \sin^2\alpha.(\sin\alpha.\cos\phi + \cos\alpha.\sin\phi)^2 ;$$

$$P(\phi, \alpha) = \cos^2\alpha.(\cos^2\alpha.\cos^2\phi - 2.\cos\alpha.\sin\alpha.\cos\phi.\sin\phi + \sin^2\alpha.\sin^2\phi) + \dots$$

$$\dots + \sin^2\alpha.(\sin^2\alpha.\cos^2\phi + 2.\cos\alpha.\sin\alpha.\cos\phi.\sin\phi + \cos^2\alpha.\sin^2\phi) ;$$

$$P(\phi, \alpha) = \cos^2\phi.(\cos^4\alpha + \sin^4\alpha) - 2.\cos\phi.\sin\phi.\cos\alpha.\sin\alpha.(\cos^2\alpha - \sin^2\alpha) + \dots$$

$$\dots + 2.\sin^2\phi.\cos^2\alpha.\sin^2\alpha ;$$

$$P(\phi, \alpha) = \cos^2\phi.(\cos^4\alpha + \sin^4\alpha) - \cos\phi.\sin\phi.\sin(2.\alpha).\cos(2.\alpha) + \frac{1}{2}.\sin^2\phi.\sin^2(2.\alpha) ;$$

$$P(\phi, \alpha) = \cos^2\phi.(\cos^4\alpha + \sin^4\alpha) - \frac{1}{2}.\cos\phi.\sin\phi.\sin(4.\alpha) + \frac{1}{2}.\sin^2\phi.\sin^2(2.\alpha).$$

Remarquons que :

$$\cos(2.\alpha) = \cos^2\alpha - \sin^2\alpha = 1 - 2.\sin^2\alpha = 2.\cos^2\alpha - 1, \text{ donc :}$$

$$\sin^2\alpha = \frac{1}{2}.(1 - \cos(2.\alpha)) \text{ et } \cos^2\alpha = \frac{1}{2}.(1 + \cos(2.\alpha)) ;$$

$$\sin^2(2.\alpha) = \frac{1}{2}.(1 - \cos(4.\alpha)).$$

D'autre part :

$$(\cos^2\alpha + \sin^2\alpha)^2 = 1 = (\cos^4\alpha + \sin^4\alpha) + 2.\cos^2\alpha.\sin^2\alpha ;$$

$$\cos^4\alpha + \sin^4\alpha = 1 - 2.\cos^2\alpha.\sin^2\alpha = 1 - \frac{1}{2}.\sin^2(2.\alpha) ;$$

$$\cos^4\alpha + \sin^4\alpha = 1 - \frac{1}{2}.\sin^2(2.\alpha) = 1 - \frac{1}{4}.(1 - \cos(4.\alpha)) = \frac{3}{4} + \frac{1}{4}.\cos(4.\alpha).$$

On a donc :

$$P(\phi, \alpha) = \cos^2\phi. \left[\frac{3}{4} + \frac{\cos(4.\alpha)}{4} \right] - \cos\phi.\sin\phi. \frac{\sin(4.\alpha)}{2} + \sin^2\phi. \left[\frac{1}{4} - \frac{\cos(4.\alpha)}{4} \right].$$

Supposons maintenant qu'il soit possible de faire varier l'angle α ; ou, si on préfère, que la mesure de α soit inconnue, et que toutes les valeurs comprises entre 0 et π soient équiprobables (car α est défini modulo π). La "probabilité de coïncidence" ne sera plus définie par la fonction $P(\phi, \alpha)$, mais par la fonction $\mathcal{P}(\phi) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi P(\phi, \alpha) d\alpha$.

Comme $\int_0^\pi \sin(4.\alpha) d\alpha = \int_0^\pi \cos(4.\alpha) d\alpha = 0$, on obtient :

$$\mathcal{P}(\phi) = \frac{3}{4}.\cos^2\phi + \frac{1}{4}.\sin^2\phi ;$$

$$\mathcal{P}(\phi) = \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot (1 + \cos(2\phi)) + \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot (1 - \cos(2\phi)) ;$$

$$\mathcal{P}(\phi) = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \cdot \cos(2\phi).$$

Cette formule donne la probabilité de coïncidence pour une paire de photons non intriqués, mais ayant la même polarisation (inconnue). Pour chaque photon, le "choix" (transmis/absorbé) se fait selon la loi de Malus probabiliste ; les deux "choix" sont indépendants.

Il est intéressant aussi, comme on va le voir, d'envisager la cas où les deux photons sont de polarisations complémentaires. On pourra supposer qu'au sortir de la source, les deux photons traversent deux filtres f_3 et f_4 d'axes perpendiculaires. Ce cas se traite facilement en inversant les rôles des "coïncidences" et des "non coïncidences". On aura simplement :

$$\mathcal{P}'(\phi) = 1 - \mathcal{P}(\phi) = 1 - \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4} \cdot \cos(2\phi) \right) ;$$

$$\mathcal{P}'(\phi) = \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \cdot \cos(2\phi).$$

Imaginons maintenant que les deux photons soient intriqués en polarisation. Nous supprimons les filtres f_3 et f_4 , qui étaient destinés à imposer une polarisation prédéterminée au deux photons ; nous utilisons une source particulière (atomes de Calcium par exemple) ayant la propriété d'émettre deux photons intriqués en polarisation. Nous supposons toujours, pour commencer, que leurs polarisations sont parallèles ; nous verrons ensuite le cas où elles sont perpendiculaires.

Dans le cas de photons intriqués, les "choix" ne sont plus indépendants. La probabilité de coïncidence est alors donnée par une autre formule, qui est celle de la physique quantique :

$$\mathcal{Q}(\phi) = \cos^2 \phi ;$$

$$\mathcal{Q}(\phi) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \cos(2\phi).$$

Une chose qu'on peut remarquer immédiatement, c'est que pour $\phi = 0$ (filtres ayant des axes parallèles entre eux), on a $\mathcal{Q}(\phi) = 1$, ce qui signifie qu'il y a toujours coïncidence : si le premier photon est transmis (resp. absorbé), le second l'est aussi.

Comment l'expliquer ? On pourrait, pour se fixer les idées, imaginer que le premier photon est représenté par deux états superposés (deux "avatars"), l'un de polarisation parallèle à l'axe du filtre 1, l'autre perpendiculaire ; lorsqu'il atteint ce filtre, l'un des avatars est élu et l'autre abandonné. Si c'est le premier avatar qui est élu, la polarisation du photon se cale parallèlement à l'axe du filtre ; il est transmis. Si c'est le second avatar qui est élu, la polarisation du

photon se cale perpendiculairement à l'axe du filtre; il est absorbé. La nouvelle parvient instantanément à l'autre photon, qui s'adapte, exactement comme s'il était passé, lui aussi, par le polariseur 1 : sa composante perpendiculaire au premier filtre s'annule, et, quand il atteint le second filtre, il a la même polarisation que le premier. La probabilité qu'il soit transmis par ce filtre 2 est alors donnée par la loi de Malus.

Cette vision intuitive doit être légèrement corrigée; d'abord, on peut inverser les rôles des deux photons : le résultat est exactement le même; il n'y a pas un photon qui décide (le "premier arrivé") et l'autre qui obéit, mais une paire intriquée. Il y a un seul choix, mais on ne sait pas par qui il a été fait ! Ensuite, le mot "instantanément" doit être remplacé par "immédiatement" : l'immédiateté a été définie plus haut, à partir de la relation $\Delta s = 0$, et s'applique parfaitement ici.

Passons au cas de photons ayant des polarisations complémentaires. Ce cas est très important, car, en pratique, on utilise souvent des atomes de Calcium pour obtenir des paires de photons intriqués : la désexcitation de ces atomes produit des photons de polarisations complémentaires. La probabilité de coïncidence est alors donnée par la formule :

$$\mathcal{Q}'(\phi) = 1 - \mathcal{Q}(\phi) = 1 - \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \cos(2 \cdot \phi) \right) ;$$

$$\mathcal{Q}'(\phi) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cdot \cos(2 \cdot \phi).$$

On peut remarquer que pour $\phi = 0$ (filtres f_1 et f_2 ayant des axes parallèles entre eux), on a $\mathcal{Q}'(\phi) = 0$, ce qui signifie qu'il n'y a jamais coïncidence : si l'un des photons est transmis, l'autre est systématiquement absorbé, et réciproquement.

Ceci correspond bien à ce qu'on observe : dans le cas de photons intriqués, la formule que nous avons calculée précédemment (avec \mathcal{P} ou \mathcal{P}') est hors jeu. Ceci ne veut pas dire qu'elle soit fautive : il faut seulement l'appliquer à bon escient.

On peut rechercher l'origine de la divergence entre les formules adaptées à la description des faisceaux lumineux comportant un grand nombre de photons ($\mathcal{P}(\phi)$, $\mathcal{P}'(\phi)$) indépendants et les formules adaptées à la description d'une paire de photons individuels intriqués ($\mathcal{Q}(\phi)$, $\mathcal{Q}'(\phi)$). Voici une hypothèse; reprenons notre calcul avant l'intégration sur α :

$$P(\phi, \alpha) = \cos^2 \phi \cdot \left[\frac{3}{4} + \frac{\cos(4 \cdot \alpha)}{4} \right] - \cos \phi \cdot \sin \phi \cdot \frac{\sin(4 \cdot \alpha)}{2} + \sin^2 \phi \cdot \left[\frac{1}{4} - \frac{\cos(4 \cdot \alpha)}{4} \right].$$

Dans notre intégration, nous avons supposé que l'angle α pouvait prendre toutes les valeurs possibles dans l'intervalle $[0, \pi[$. C'était logique, dans la mesure où il était possible de faire tourner à volonté les filtres f_3 et f_4 , pour

imposer aux deux faisceaux une direction de polarisation choisie. Mais dans le cas de deux photons intriqués, de polarisations perpendiculaires, émis par un atome de Calcium, on peut penser que l'angle α n'est pas défini, au sens où nous l'entendons habituellement. La notion d'angle mathématique est beaucoup trop complexe pour être maîtrisée par des photons ! La seule chose qu'ils connaissent se résume par "parallèle/perpendiculaire", ou plutôt "passe/ne passe pas", "absorbé/transmis". Les seuls angles reconnus par une paire de photons sont $0 + k.\pi$ (parallélisme) et $\frac{\pi}{2} + k.\pi$ (orthogonalité). Or si $\alpha = 0 + k.\pi$ ou $\alpha = \frac{\pi}{2} + k.\pi$, on a toujours $\cos(4.\alpha) = 1$ et $\sin(4.\alpha) = 0$; donc la formule ci-dessus s'identifie automatiquement à celle de la physique quantique, sans qu'il soit besoin de faire une intégration.

Ceci rapproche la notion de polarisation, définie en physique classique, de l'étrange notion de spin, mise en évidence par l'expérience de Stern et Gerlach.

Etrange, parce-que la structure de l'espace (ici, des angles) n'est pas "perçue" de la même façon par les "particules" élémentaires que par les structures macroscopiques complexes : la géométrie telle que nous la connaissons est "construite" par le monde macroscopique, avec l'aide de la loi des grands nombres.

Nous avons dit que le passage d'un faisceau lumineux non polarisé à travers un filtre polarisant est un phénomène irréversible, car la moitié de l'énergie est arrêtée. Si on considère un ensemble de photons, c'est toujours vrai, en ce sens que la moitié des photons est arrêtée. Mais si on considère un photon individuel qui n'a pas été arrêté par le polariseur, on pourrait penser qu'à la sortie du polariseur sa polarisation est nécessairement parallèle à l'axe de celui-ci, donc fixée de manière objective, absolue et définitive ; en réalité, cette modification est relative, temporaire et réversible.

On retiendra surtout que la grande difficulté de la physique quantique se situe au niveau de l'articulation du microscopique et du macroscopique, ou plus exactement du simple et du complexe. Le simple, c'est le domaine des interactions élémentaires ; le complexe, c'est l'ensemble des structures qui en résultent.

Mais profitons de cette présentation de la polarisation pour introduire les inégalités de Bell, sous une forme simplifiée.

Adaptons nos notations. Disons que la direction de polarisation du premier photon fait un angle α_1 avec l'axe du filtre f_1 , et que celle du second fait un angle α_2 avec l'axe du filtre f_2 (cet angle correspondant à $\alpha + \phi$). Nous supposons que la probabilité p qu'un photon soit transmis dépend (de manière probabiliste) de l'angle formé par sa direction de polarisation et l'axe du filtre rencontré. La probabilité que le premier photon soit transmis par f_1 est donc $p(\alpha_1) = p_1$, et la probabilité que le second photon soit transmis par f_2 est $p(\alpha_2) = p_2$.

Nous allons exprimer les probabilités que les deux photons soient transmis,

ou seulement le premier, ou seulement le second, ou aucun des deux, de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
 P_{++} &= P_{++}(\alpha_1, \alpha_2) = p_1 \cdot p_2 ; \\
 P_{+-} &= P_{+-}(\alpha_1, \alpha_2) = p_1 \cdot (1 - p_2) = p_1 - p_1 \cdot p_2 ; \\
 P_{-+} &= P_{-+}(\alpha_1, \alpha_2) = (1 - p_1) \cdot p_2 = p_2 - p_1 \cdot p_2 ; \\
 P_{--} &= P_{--}(\alpha_1, \alpha_2) = (1 - p_1) \cdot (1 - p_2) = 1 - p_1 - p_2 + p_1 \cdot p_2 .
 \end{aligned}$$

Dans nos calculs précédents, nous avons supposé que $p(\alpha) = \cos^2 \alpha$ (idée inspirée par la loi de Malus); ici, nous admettons qu'il peut exister d'autres formules à tester.

Au cas où α_1 et α_2 seraient bien des angles, nous ne souhaitons pas préciser si on a $\alpha_2 = \alpha_1 + \phi + k \cdot \pi$ (cas des photons de polarisations parallèles, dans notre raisonnement précédent), ou $\alpha_2 = \alpha_1 + \phi + \frac{\pi}{2} + k \cdot \pi$ (polarisations perpendiculaires) : ceci n'a aucune importance.

Mais, surtout, rien ne nous oblige à considérer α_1 et α_2 comme des angles obéissant aux règles de la trigonométrie : on peut imaginer que ce sont des "variables cachées", dont la signification nous est inconnue, se combinant selon des règles également inconnues.

On a utilisé ici les lois mathématiques de la théorie des probabilités, en particulier (A et B désignant deux propositions quelconques) :

$$\begin{aligned}
 p(\overline{A}) &= 1 - p(A) ; \\
 P(A \cap B) &= P(A) \cdot P(B) .
 \end{aligned}$$

Première formule : la probabilité de "non A " (noté \overline{A}) est égale à "1 moins probabilité de A ".

Deuxième formule : la probabilité de " A et B " (noté $A \cap B$) est égale au produit : "probabilité de A " multipliée par "probabilité de B ", à condition que ces deux probabilités soient indépendantes, c'est-à-dire que toute information sur l'une ne donne aucune information sur l'autre.

C'est ici le point crucial : nous supposons que les probabilités p_1 et p_2 sont indépendantes; autrement dit, le "choix" qui s'effectue au niveau du filtre f_1 n'influence pas celui qui s'effectue au niveau de f_2 (et réciproquement).

En combinant les égalités ci-dessus, on peut en obtenir d'autres ; par exemple :

$$\begin{aligned}
 P_{++} + P_{+-} &= p_1 ; \\
 P_{++} + P_{-+} &= p_2 ; \\
 P_{--} + P_{-+} &= 1 - p_1 ;
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{--} + P_{+-} &= 1 - p_2 ; \\
P_{++} + P_{--} &= 1 - p_1 - p_2 + 2.p_1.p_2 ; \\
P_{+-} + P_{-+} &= p_1 + p_2 - 2.p_1.p_2 ; \\
P_{++} + P_{+-} + P_{-+} + P_{--} &= 1 ; \\
P_{++}.P_{--} &= P_{+-}.P_{-+}.
\end{aligned}$$

Une idée de Bell est de s'intéresser à la quantité suivante :

$$\begin{aligned}
E(\alpha_1, \alpha_2) &= (P_{++} + P_{--}) - (P_{+-} + P_{-+}) ; \\
E(\alpha_1, \alpha_2) &= (1 - p_1 - p_2 + 2.p_1.p_2) - (p_1 + p_2 - 2.p_1.p_2) ; \\
E(\alpha_1, \alpha_2) &= 4.p_1.p_2 - 2.p_1 - 2.p_2 + 1 ; \\
E(\alpha_1, \alpha_2) &= (2.p_1 - 1).(2.p_2 - 1).
\end{aligned}$$

Mais la véritable astuce de Bell est d'envisager plusieurs configurations des filtres ; par exemple, on pourra faire tourner le premier filtre d'un angle donné (la variable cachée α_1 prendra alors la valeur α'_1), ou bien le second (la variable cachée α_2 prendra alors la valeur α'_2), ou les deux. On va faire ensuite des statistiques avec les quatre combinaisons ainsi obtenues.

On va alors considérer la quantité :

$$\begin{aligned}
\Delta &= \Delta(\alpha_1, \alpha'_1, \alpha_2, \alpha'_2) = |E(\alpha_1, \alpha_2) + E(\alpha_1, \alpha'_2)| + |E(\alpha'_1, \alpha_2) - E(\alpha'_1, \alpha'_2)| ; \\
\Delta &= |(2.p_1 - 1).(2.p_2 - 1) + (2.p_1 - 1).(2.p'_2 - 1)| + |(2.p'_1 - 1).(2.p_2 - 1) - (2.p'_1 - 1).(2.p'_2 - 1)| ; \\
\Delta &= |(2.p_1 - 1).(2.p_2 - 1 + 2.p'_2 - 1)| + |(2.p'_1 - 1).(2.p_2 - 1 - 2.p'_2 + 1)| ; \\
\Delta &= |2.p_1 - 1|. |2.p_2 + 2.p'_2 - 2| + |2.p'_1 - 1|. |2.p_2 - 2.p'_2|.
\end{aligned}$$

Comme $0 \leq p_1 \leq 1$, on a : $-1 \leq 2.p_1 - 1 \leq 1$; de même : $-1 \leq 2.p'_1 - 1 \leq 1$; donc :

$$\begin{aligned}
|\Delta| &\leq |2.p_2 + 2.p'_2 - 2| + |2.p_2 - 2.p'_2| ; \\
\frac{1}{2}.\Delta &\leq |p_2 + p'_2 - 1| + |p_2 - p'_2|.
\end{aligned}$$

La valeur absolue de $p_2 + p'_2 - 1$ est égale soit à $p_2 + p'_2 - 1$, soit à : $-p_2 - p'_2 + 1$.

La valeur absolue de $p_2 - p'_2$ est égale soit à $p_2 - p'_2$, soit à : $-p_2 + p'_2$.

Pour évaluer le membre de droite de notre inégalité, il faut donc examiner quatre combinaisons :

- a) $p_2 + p'_2 - 1 + p_2 - p'_2 = 2.p_2 - 1 \leq 1$;
- b) $p_2 + p'_2 - 1 - p_2 + p'_2 = 2.p'_2 - 1 \leq 1$;

$$c) -p_2 - p'_2 + 1 + p_2 - p'_2 = -2.p'_2 + 1 \leq 1 ;$$

$$d) -p_2 - p'_2 + 1 - p_2 + p'_2 = -2.p_2 + 1 \leq 1.$$

On voit donc qu'on a, dans tous les cas : $\frac{1}{2}.\Delta \leq 1$, donc $\Delta \leq 2$.

C'est l'une des variantes de l'inégalité de Bell.

Reprenons les calculs que nous avons faits pour des photons non intriqués ; nous avons obtenu : $\mathcal{P}(\phi) = \frac{1}{2} + \frac{1}{4}.\cos(2.\phi)$ pour des photons de polarisations parallèles, $\mathcal{P}'(\phi) = \frac{1}{2} - \frac{1}{4}.\cos(2.\phi)$ pour des photons de polarisations perpendiculaires. Rappelons que ϕ était l'angle formé par les axes des polariseurs ($\phi = |\alpha_2 - \alpha_1|$) et que $\mathcal{P}(\phi)$ et $\mathcal{P}'(\phi)$ étaient des probabilités de coïncidence : $P_{++} + P_{--}$. Faisons la vérification pour $\mathcal{P}(\phi)$.

$$E(\alpha_1, \alpha_2) = (P_{++} + P_{--}) - (P_{+-} + P_{-+}) = P_{++} + P_{--} - [1 - (P_{++} + P_{--})] ;$$

$$E(\alpha_1, \alpha_2) = -1 + 2.\mathcal{P}(\phi) = -1 + 2. \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{4}.\cos(2.\phi) \right] ;$$

$$E(\alpha_1, \alpha_2) = \frac{1}{2}.\cos(2.\phi) = \frac{1}{2}.\cos 2.(\alpha_2 - \alpha_1).$$

On a donc :

$$\Delta = \frac{1}{2}. [|\cos 2.(\alpha_2 - \alpha_1) + \cos 2.(\alpha'_2 - \alpha_1)| + |\cos 2.(\alpha_2 - \alpha'_1) - \cos 2.(\alpha'_2 - \alpha'_1)|] ;$$

$$\Delta \leq \frac{1}{2}. [|\cos 2.(\alpha_2 - \alpha_1)| + |\cos 2.(\alpha'_2 - \alpha_1)| + |\cos 2.(\alpha_2 - \alpha'_1)| + |\cos 2.(\alpha'_2 - \alpha'_1)|] ;$$

$$\Delta \leq \frac{1}{2}. [1 + 1 + 1 + 1] = 2.$$

L'inégalité de Bell est bien respectée, comme on pouvait s'y attendre, puisque les probabilités de transmission/absorption des deux photons par les filtres f_1 et f_2 sont indépendantes.

Reprenons maintenant les formules concernant les photons intriqués, c'est-à-dire : $\mathcal{Q}(\phi) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}.\cos(2.\phi)$ pour les photons de polarisations parallèles, $\mathcal{Q}'(\phi) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}.\cos(2.\phi)$ pour des photons de polarisations perpendiculaires. Choisissons par exemple la première formule :

$$E(\alpha_1, \alpha_2) = -1 + 2.\mathcal{Q}(\phi) = -1 + 2. \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2}.\cos(2.\phi) \right] = \cos(2.\phi) = \cos 2.(\alpha_2 - \alpha_1) ;$$

$$\Delta = |\cos 2.(\alpha_2 - \alpha_1) + \cos 2.(\alpha'_2 - \alpha_1)| + |\cos 2.(\alpha_2 - \alpha'_1) - \cos 2.(\alpha'_2 - \alpha'_1)|.$$

Nous voulons montrer que, dans certains cas, Δ peut être supérieur à 2.

Pour cela, plaçons-nous dans un cas particulier : $\alpha'_2 = \alpha_1$. On a alors

$$\Delta = |\cos 2(\alpha_2 - \alpha_1) + 1| + |\cos 2(\alpha_2 - \alpha'_1) - \cos 2(\alpha_1 - \alpha'_1)|.$$

Posons : $\phi = \alpha_2 - \alpha_1$. Choisissons α'_1 tel que $\alpha_1 - \alpha'_1 = \alpha_2 - \alpha_1 = \phi$, autrement dit : $\alpha'_1 = 2\alpha_1 - \alpha_2$, ce qui entraîne aussi : $\alpha_2 - \alpha'_1 = \alpha_2 - \alpha_1 + \alpha_1 - \alpha'_1 = 2\phi$. Il vient :

$$\Delta = |1 + \cos(2\phi)| + |\cos(4\phi) - \cos(2\phi)|.$$

On peut remarquer que, pour ϕ suffisamment petit ($0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{3}$), on a : $\cos(2\phi) \geq \cos(4\phi)$; on a alors :

$$\Delta = 1 + \cos(2\phi) + \cos(2\phi) - \cos(4\phi) = 1 + 2\cos(2\phi) - 2\cos^2(2\phi) + 1 ;$$

$$\Delta = 2.(-\cos^2(2\phi) + \cos(2\phi) + 1).$$

Si on considère la fonction $f(x) = -x^2 + x + 1$, sa dérivée $f'(x) = -2x + 1$ s'annule pour $x = \frac{1}{2}$; la fonction $\Delta(\phi)$ atteint son maximum pour $\cos(2\phi) = \frac{1}{2}$, soit $2\phi = \frac{\pi}{3}$, c'est-à-dire $\phi = \frac{\pi}{6}$. On a alors :

$$\Delta_{max} = 2. \left(-\cos^2 \frac{\pi}{3} + \cos \frac{\pi}{3} + 1 \right) = 2. \left(-\frac{1}{4} + \frac{1}{2} + 1 \right) = 2,5 > 2.$$

L'inégalité de Bell est très clairement violée, ce qui signifie qu'il ne sera jamais possible de mimer la formule de la physique quantique, dans le cas de photons intriqués, en faisant appel à une variable cachée, tout en respectant le principe de localité, selon lequel les "choix" qui s'effectuent au niveau des deux filtres f_1 et f_2 ne doivent pas s'influencer.

Mais, comme on le sait, la formule de la physique quantique a toujours été confirmée par toutes les expériences, et la nature viole bien l'inégalité de Bell, comme l'a prouvé Alain Aspect.

Ceci marque la fin des théories "locales" faisant appel à des variables cachées ; en même temps, c'est un triomphe de la relativité restreinte.

Ceci n'est pas un problème, si on admet que ces deux "choix" sont liés par l'"immédiateté" ($\Delta s = 0$) : il s'agit, en réalité, d'un seul choix. On pourrait même, pour se fixer les idées, imaginer que le choix se fait au moment de l'émission des deux photons intriqués par la source S , et que ce choix est "immédiatement" (pas instantanément !) répercuté aux deux points de réception des deux photons. Ceci s'explique facilement par la fonction élémentaire de l'immédiateté :

$$f(\vec{r}, t) = f(\vec{0}, 0).e^{i.(\vec{k}.\vec{r} - \omega.t)}.$$

Comme, dans le cas de la lumière, $\omega = \frac{2\pi}{T}$ et $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{c.T} = \frac{\omega}{c}$, on peut écrire, en supposant \vec{k}/\vec{r} :

$$f(\vec{r}, t) = f(\vec{0}, 0).e^{\frac{\omega}{c}.i.(r - c.t)},$$

ou, en termes de fonction d'onde :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{0}, 0).e^{\frac{\omega}{c}.i.(r-c.t)}.$$

Si r désigne la distance parcourue par la lumière pendant le temps t , on a : $r = c.t$, donc $e^{\frac{\omega}{c}.i.(r-c.t)} = e^0 = 1$, ce qui entraîne :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{0}, 0).$$

Si on situe en $(\vec{0}, 0)$ l'événement "émission des deux photons par la source", en (\vec{r}_1, t_1) l'événement "rencontre du premier photon avec le premier filtre", et en (\vec{r}_2, t_2) l'événement "rencontre du second photon avec le second filtre", alors :

$$\Psi(\vec{0}, 0) = \Psi(\vec{r}_1, t_1) = \Psi(\vec{r}_2, t_2).$$

Ceci signifie que les trois événements apparents n'en font qu'un : ils sont évidemment intriqués. Mais on peut encore se poser cette question : on a l'impression qu'en (\vec{r}_1, t_1) et en (\vec{r}_2, t_2) se produisent deux "choix" (le photon passe ou ne passe pas à travers le filtre). Si on raisonne en termes de choix ("Dieu joue aux dés"), alors on doit dire qu'il n'y a qu'un choix (un seul tirage de dés, qui décide à la fois si le premier photon est arrêté par le premier filtre, et le second photon par le second filtre). Il ne peut pas y avoir deux choix indépendants. Mais il est permis de penser qu'il n'y a pas de tirage de dés, mais un déterminisme qui impose un comportement prédéterminé du premier photon au niveau du premier filtre, et du second photon au niveau du second filtre. Mais alors il ne peut pas y avoir deux déterminismes indépendants (basés sur des critères n'interférant pas entre eux).

Les expériences telles que celle d'Alain Aspect et les inégalités de Bell ne permettent pas de prouver que la physique soit fondamentalement probabiliste, ou fondamentalement déterministe; mais elle prouve que l'intrication est une réalité, et que toute théorie locale de la physique est définitivement hors jeu.