Complexité maximum: comment ”comprendre” la mécanique quantique ?

Yves Pomeau et Martine Le Berre

October 17, 2017

Plan de l'exposé

Trois phénomènes physiques restent incompris à la fin du 19ème siècle: le spectre de rayonnement du corps noir, l'existence de raies bien définies dans les spectres d'émission et d'absorption des atomes et l'effet photoélectrique montrant une "concentration" considérable de l'énergie d'un faisceau lumineux.
Comment expliquer tout ça?
La mécanique quantique permet de comprendre tout ces phénomènes, et bien d'autres, au prix de l'introduction de nombreuses idées nouvelles dont certaines continuent de susciter le débat (essentiellement celles ayant trait à l'aspect "statistique" de la nouvelle mécanique).
J'esquisserai à la fin un exemple d'application de cette réflexion au cas de la fluorescence d'atomes isolés.

Exposé

Les conceptions statistiques sont essentielles pour faire le lien entre le formalisme mathématique de la théorie quantique et ses conséquences physiques. La difficulté se trouve dans le fait que ces conceptions statistiques ne sont essentielles que pour une partie de la phénoménologie: l'existence de niveaux atomiques d'énergie bien définie explique l'existence des raies spectrales, avec la relation énergie-fréquence et la conservation de l'énergie. En revanche la loi du corps noir et l'effet photoélectrique exigent pour leur compréhension l'introduction d'idées statistiques particulières à la mécanique quantique.

L'enseignement (au moins en France) fait grand cas d'un concept peu clair, celui de réduction du paquet d'onde. On comprend mal son statut: est-il une conséquence de la théorie quantique ou constitue-t-il un principe nouveau devant être ajouté au reste de la théorie? Landau dans l'introduction (chapitre 1) de Mécanique quantique ne parle évidemment pas de "réduction du paquet d'onde" et centre sa subtile discussion sur le principe d'incertitude de Heisenberg. Il donne sa version de la question de la mesure dans la section 7, où, comme toujours chez lui, chaque mot a un sens.

J'imagine que l'imprécision conceptuelle de cette "réduction du paquet d'onde" a rendu certains mathématiciens, dont René Thom, très sceptiques vis-à-vis de la mécanique quantique.
Pourquoi et comment "réduire le paquet d'ondes?"
Comment expliquer la "concentration d'énergie" observée dans l'effet photoélectrique. Cette concentration permet l'ionisation d'un atome et l'émission d'un électron, même si le flux lumineux est très faible.
La conception de la lumière comme flux de particules (les photons) est, avec quelques nuances, celle de Newton. Les photons deviennent moins denses quand le flux diminue, tout en conservant la même énergie, ce qui est en accord avec l'existence de l'effet photoélectrique, y compris aux flux très faibles.

Antagonisme manifeste entre cette vision "corpusculaire" de la nature de la lumière et l'observation de la réflexion partielle, pour ne rien dire des interférences et de la diffraction, ces dernières prouvant (Young, Fresnel) que la lumière est une onde + confirmation de cette conception ondulatoire par la théorie de Maxwell.
Pas conceptuel important par Planck qui explique le spectre du corps noir en introduisant dans un cadre statistique classique l'idée de quantum d'énergie. Mais il n'est pas encore clair que ceci nécessite une théorie statistique différente de celle de Boltzmann pour des particules obéissant aux lois de la mécanique classique (newtonienne). Dans ce dernier cas, l'approche statistique se justifie (Boltzmann) par la propriété d'ergodicité des trajectoires classiques, une propriété mathématique difficile à prouver à partir des lois de la mécanique classique mais qui ne réclame pas d'hypothèse physique nouvelle.

En revanche il faudra une hypothèse nouvelle pour expliquer l'effet photoélectrique en utilisant la notion de quantum d'énergie.
Einstein (1905) suppose que l'échange d'énergie entre atomes et rayonnement se fait par sauts quantiques et que, lors de chaque saut, une énergie $\hbar\omega$ est échangé. Ceci rend bien compte d'un des aspects fondamentaux de l'effet photoélectrique mais n'introduit toujours pas clairement d'idée statistique nouvelle.
Ce n'est qu'en 1917 que le pas est vraiment franchi par Einstein. Il retrouve la loi du corps noir de Planck en utilisant une description statistique de l'interaction atome-rayonnement. Il suppose que les échanges se font par sauts quantiques instantanés et de façon aléatoire. Il imagine donc un processus dynamique (peu explicite d'ailleurs dans l'article original) statistique pour les populations de deux niveaux d'un atome interagissant avec le champ. Cette évolution se fait par suite de trois processus élémentaires:
l'émission spontanée (coefficient A par unité de temps),
l'absorption (coefficient $B\rho$, ρ densité du rayonnement) et
l'émission induite (coefficient $B'\rho$).

Sans écrire l'équation d'évolution des populations, Einstein déduit de la loi de Boltzmann pour les deux niveaux d'énergie la loi de Planck pour le spectre (soit pour ρ dans ses notations).
L'image statistique de cette théorie d'Einstein est que le champ EM interagit avec l'atome par émission ou absorption de photon, mais que ces deux processus ne sont pas déterministes, ce ne sont que des phénomènes instantanés se produisant au hasard avec une probabilité dépendant de l'amplitude du champ quand c'est une absorption. Einstein, naturellement conscient du "saut dans l'inconnu" qu'implique cette hypothèse sur le caractère aléatoire en temps de ces sauts, reporte à une future théorie son explication, dont il voit bien qu'elle ne peut venir de la physique classique. Il restera d'ailleurs toute sa vie très réticent, pour ne pas dire davantage, aux explications fournies sur cette question.
Dix ans après le papier d'Einstein, Dirac (1927) reprend cette question et explique comment déduire les coefficients d'Einstein de la nouvelle mécanique quantique.

Le superbe papier de Dirac n'est pas très facile à suivre parce qu'il utilise un formalisme assez différent de celui que nous utilisons aujourd'hui (et qui d'ailleurs lui est aussi dû). Dirac calcule donc, grâce aux nouveaux moyens que donne la théorie quantique, le taux d'émission de photons par décroissance spontanée et aléatoire d'un état excité.
Dirac part du système formé par un atome dans l'état excité et un ensemble d'oscillateurs interagissant avec cet atome et dans leur état fondamental (soit le champ EM sans photon). Dans un calcul perturbatif il montre qu'aux temps courts l'amplitude de l'état fondamental, nulle à l'instant initial, croît linéairement avec le temps. Ceci s'interprète comme un taux de transition constant avec le temps. Cette remarquable théorie ne fait nulle part appel à une quelconque réduction de paquet d'onde.

L'appel à une interprétation statistique de la mécanique quantique est (trop) souvent fait sans expliquer clairement ce qui est entendu par là: une théorie statistique n'existe pas en soi mais elle doit aussi satisfaire à certaines contraintes logiques qui lui donnent au moins en partie sa structure. Ces deux contraintes, en termes mathématiques sont que la probabilité est positive ou nulle et que la probabilité totale vaut un. Les équations d' évolution de cette probabilité ne peuvent pas prendre n'importe quelle forme. Kolmogorov a donné les formes possibles pour ces équations d'évolution.

Avant de passer à une application de ces idées à un cas physique un peu complexe, je vais montrer comment déduire de cette notion de taux de transition entre états atomiques l'interprétation dite d'Everett de la mécanique quantique. La transition vers le fondamental par émission spontanée entraine une croissance de la norme de cet état fondamental, mais en lui additionnant une contribution de phase aléatoire. Ceci se décrit mal dans le formalisme des fonctions d'onde. En revanche, travailler avec la matrice densité permet de bien rendre compte de l'accroissement de la norme de la fonction d'onde du fondamental lors des sauts quantiques. Comme il s'agit de l'addition d'un terme de phase aléatoire, seule la partie diagonale de la matrice densité est modifiée. Les termes non diagonaux restent inchangés par suite de l'existence de cette phase aléatoire: linéaires dans cet ajout à la fonction d'onde ils disparaissent par moyenne sur la phase aléatoire.

Si on suppose que le terme diagonal de la matrice densité représentant l'état fondamental était nul avant l'émission, on crée une nouvelle composante de cette matrice densité qui est celle de l'état fondamental. Par la suite, tout terme de la matrice densité ayant une composante sur cet état fondamental va correspondre à un bloc de la matrice densité qui restera disjoint du reste de cette matrice, pratiquement donc de ses composantes - dans ce cas- qui ont un indice de l'état excité de l'atome, qui formera un autre bloc disjoint de la matrice densité. Le résultat sera l'apparition de deux univers séparés, chacun provenant de l'évolution de l'un des deux blocs disjoints de la matrice densité. Chacun de ces univers sera affecté d'une probabilité qui sera la trace partielle du bloc correspondant, mais il n'y aura plus de transition entre les deux univers. Ceci représente dans le cas présent une bifurcation entre deux histoires différentes: celle où l'émission a eu lieu et celle où elle n'a pas eu lieu.
Je remarque que, dans le formalisme de la matrice densité il n'y a pas besoin de faire appel à une phase aléatoire.

On peut s'interroger, comme dans le cas de l'irréversibilité classique, sur ce qui explique l'irréversibilité de l'évolution ainsi décrite. Dans le cas présent l'explication est très simple: l'émission du photon se fait vers l'infini. Un renversement du temps impliquerait de changer ce photon émis en photon venant de l'infini, ce qui ne correspond à aucune condition initiale réalisable. Le cas de systèmes fermés est, de ce point de vue, plus difficile à réconcilier avec la vision d'Everett. Il est probable qu'il faut encore faire intervenir l'infini d'espace en supposant l'existence d'un thermostat extérieur.

Le reste de l'exposé est consacré à l'étude d'un problème simple où s'appliquent les idées sur le lien entre statistique et mécanique quantique. Il s'agit de la fluorescence d'un atome unique.
Cette fluorescence se produit lorsqu'un atome (en fait souvent un ion dans un piège de Paul) est soumis à une radiation monochromatique à la fréquence de résonance entre deux niveaux, dont l'un est le fondamental. Ceci donne lieu à ce que l'on appelle des oscillations de Rabi optiques entre les deux niveaux. Ces oscillations se décrivent avec la fonction d'onde

$$\Psi_{at}(t) = (\cos\theta(t)|g> + i\sin\theta(t)|e>)\, e^{i\varphi}$$

$|g>$ est l'état fondamental et $|e>$ l'état excité de l'atome.
L'angle $\theta(t)$ varie linéairement avec le temps: $\theta(t) = \Omega t/2$ où Ω est la nutation de Rabi proportionnelle au champ de l'onde monochromatique excitatrice. Lorsque l'atome est dans l'état excité il fait des transitions spontanées vers le fondamental en émettant un photon en sus des oscillations de Rabi.

Comme dans le modèle d'Einstein ces transitions se font instantanément (le saut quantique), ce qui correspond à ce qu'on appelle un processus de Markov. Lors d'une transition, l'atome passe de l'état excité au fondamental. Ce changement "d'ordre 1" de l'état atomique est accessible à un calcul de perturbation parce que, s'il concerne un changement d'amplitude unité, il est peu probable. Ceci est au coeur de l'interprétation statistique de la mécanique quantique et impose d'utiliser une théorie de type Kolmogorov pour la dynamique (une extension du modèle d'Einstein-1917).
La nouveauté par rapport à ce modèle est que l'état de l'atome n'est pas un état propre mais, a priori, une superposition linéaire du fondamental et de l'état excité, superposition décrite précisément par l'angle θ. L'émission du photon, si elle a lieu, ramène l'atome de l'état excité au fondamental avec un taux γ par unité de temps, le taux calculé par Dirac.

L' équation d'évolution de la probabilité d'avoir un angle θ s'écrit:
$\partial_t p + \frac{\Omega}{2}\partial_\theta p =$
$\gamma \left(\delta(\sin(\theta)) \left(\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \mathrm{d}\theta' \ p(\theta', t) \sin^2(\theta') \right) - p(\theta, t) \sin^2(\theta) \right)$
C'est une équation de type Kolmogorov. Le membre de gauche décrit la nutation optique de Rabi, qui se fait avec la période $4\pi/\Omega$ sous l'effet d'un champ de pompe qui est exactement à la fréquence de la transition de l'atome. L'objet fondamental de cette théorie est la fonction de distribution $p(\theta, t)$ qui permet de décrire complètement l'état de l'atome qui est a priori une superposition quelconque de l'état fondamental et de l'état excité. Cette distribution est une distribution de probabilité sur les différentes histoires possibles d'émission de l'atome. Le terme de droite est de type Kolmogorov et décrit l'évolution sous l'effet du processus d'émission avec un terme de gain (le premier terme) et un terme de perte (le second terme). Grâce à sa structure cette équation conserve la probabilité totale (pas le cas de la plupart des théories existantes sur le sujet) et aussi le caractère positif de la probabilité.

On retrouve la théorie d'Einstein dans le cas de l'émission seulement en prenant $p(\theta, t = 0) = \delta(\theta - \pi/2)$, soit un atome partant dans l't́at excité et sans champ de pompe $(\Omega = 0)$. L'équation de Kolmogorov se transforme en deux ODE pour les amplitudes couplées de l'état excité (u) et fondamental (v):

$$\dot{u} = -\dot{v} = -\gamma u(t),$$

Ces équations satisfont la conservation de la probabilité puisque la dérivée de $(u+v)$ s'annule. Avec la condition initiale $u(0)=1$ et $v(0)=0$, la solution s'écrit

$$u(t)=e^{-\gamma\sin^2(\theta_0)t}.$$

et

$$v(t)=1-e^{-\gamma\sin^2(\theta_0)t}.$$

En sus de la conservation de la probabilité cette solution est aussi en accord avec le fait que seul l'état excité décroit. Ceci résulte simplement de ce que la population de cet état vaut:

$$n_e(t)=\sin^2(\theta_0)u(t),$$

une population qui décroit donc avec le taux $\gamma\sin^2\theta_0$. On déduit de ce résultat la solution générale de l'équation pour une donnée initiale $p(\theta,0)=p_0(\theta)$:

$$p(\theta,t)=p_0(\theta)e^{-\gamma\sin^2(\theta)t}+\delta(\theta)\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\mathrm{d}\theta\ p_0(\theta)(1-e^{-\gamma\sin^2(\theta)t}).$$

Cette solution est intéressante parce qu'elle montre que le taux de décroissance dépend de la totalité de la donnée initiale, un phénomène typiquement quantique. Pour θ petit le temps pendant lequel on peut observer l'état excité est raccourci parce que la probabilité de transition vers l' état fondamental est petite.
On peut aussi dire que cet allongement du temps de décroissance interpole entre le temps de décroissance γ^{-1} pour un état excité pur et un temps de décroissance infini quand l'amplitude initiale de l'état excité est nulle.
Pour expliquer pourquoi la valeur initiale de θ figure dans la solution à des temps ultérieurs il faut revenir à la signification de la statistique dans ce problème: la donnée initiale est une superposition d'états excités et fondamentaux. Les sauts quantiques font décroitre la probabilité de l'état excité. Après chaque saut la trajectoire quantique restera dans le fondamental et ne fera pas de nouveau saut. Les sauts auront lieu sur les trajectoires n'ayant pas subi de saut depuis l'origine du temps. Par conséquent sur ces trajectoires l'état quantique sera identique à celui du début, ce qui explique pourquoi la valeur initiale de θ figure dans la solution aux temps ultérieurs.

En utilisant l'équation de Kolmogorov on peut trouver 1) le temps moyen de décroissance de l'état excité lorsque celui-ci est mélangé initialement à l'état fondamental, 2) le temps de réception moyen d'un photon. Remarquablement les deux temps ne concident que dans le cas où l'état initial est l'état excité pur.
L'application des principes généraux de la théorie des processus de Markov conduit à la formule suivante pour la distribution de probabilité des temps t de décroissance:

$$K(t) = \gamma \sin^2(\theta_0) e^{-\gamma t \sin^2(\theta_0)}$$

Distribution normalisée.
Le temps moyen de décroissance vaut:

$$< t >= \int_0^\infty \mathrm{d}t \; t \; K(t) = \frac{1}{\gamma \sin^2(\theta_0)}$$

Mais cette décroissance ne produit un photon enregistré qu'avec la probabilité $\sin^2(\theta_0)$ parce que le champ EM émis est une superposition linéaire d'états à zéro et un photon. Et seul ceux à un photon peuvent contribuer.

Soit donc t_{ph} le temps moyen d'enregistrement d'un photon émis. Sa valeur moyenne vaut

$$< t_{ph} >= \int_0^\infty \mathrm{d}t \ t \ K(t) \sin^2(\theta_0) = \frac{1}{\gamma}$$

Elle est (remarquablement) indépendante de θ_0.
Un dispositif enregistrant les photons émis par un faisceau d'atomes soit dans un état excité ou dans le fondamentall ne fera donc pas la différence entre ce faisceau et un faisceau d'atomes dans un état mélange du fondamental et de l'état excité.

Conclusion:
La complexité de la mécanique quantique en fait un cas de théorie des processus aléatoires, mais pas une théorie fondamentalement différente.
Merci de votre attention!