

A. Particule sans degrés de liberté internesButs de ce § A

La matrice $\langle i|\sigma|j\rangle$, qui représente l'opérateur densité σ d'une particule dans une base $\{|i\rangle\}$ de l'espace des états, dépend de 2 indices i et j . Si la base est continue, comme par exemple la base $\{|\vec{r}\rangle\}$ des états propres de l'opérateur position $\vec{R}$, la matrice densité associée à σ dépend de 2 variables $\vec{r}'$ et $\vec{r}''$: $\sigma(\vec{r}', \vec{r}'') = \langle \vec{r}'|\sigma|\vec{r}''\rangle$

Un premier but de ce § A est de montrer qu'à partir de $\sigma(\vec{r}', \vec{r}'')$, il est possible d'introduire une fonction de $\vec{r}$ et $\vec{p}$, la fonction de Wigner $W(\vec{r}, \vec{p})$, qui présente beaucoup d'analogies avec la fonction de distribution d'une particule classique dans l'espace des phases.

Un deuxième but de ce § A est de montrer que l'équation d'évolution de $W(\vec{r}, \vec{p})$, correspondant à l'équation d'évolution $i\hbar\dot{\sigma} = [H, \sigma]$ de σ , rappelle par certains côtés une équation de Fokker-Planck, et que le propagateur de $W(\vec{r}, \vec{p})$ satisfait à une équation du type équation de Smolouchowski pour un processus de Markov.

Ainsi, tout en restant quantique, la description de l'état de la particule par la fonction de Wigner se rapproche beaucoup de celle de la mécanique statistique classique. Cette description sera ensuite étendue au § B au cas d'un atome, ayant des degrés de liberté internes, interagissant avec le champ de rayonnement.

① Représentation position ou impulsion

(pour simplifier les notations, nous ne mettons pas de flèches sur r et p , sauf quand cela pourrait prêter à confusion)

Base $\{|r\rangle\}$ des états propres de la position R

- Éléments de matrice de σ $\langle r'|\sigma|r''\rangle$ (7.1)
- Densité de probabilité de présence en r' : $R(r')$ $R(r') = \langle r'|\sigma|r'\rangle$ (7.2)
- Normalisation $\int dr' R(r') = 1$ (7.3)

Remarque: si σ correspond à une particule d'impulsion p_0 , c.-à-d. si $\sigma = |p_0\rangle\langle p_0|$, alors $\langle r'|\sigma|r''\rangle = \langle r'|p_0\rangle\langle p_0|r''\rangle$ est proportionnel à $\exp\{ip_0(r'-r'')/\hbar\}$

Impulsion p_0 bien définie $\rightarrow \langle r'|\sigma|r''\rangle \sim e^{ip_0(r'-r'')/\hbar}$ (7.4)

Ainsi, une dépendance oscillante en $r'-r''$ caractérise une impulsion bien définie

Base $\{|p\rangle\}$ des états propres de l'impulsion P

- Éléments de matrice de σ $\langle p'|\sigma|p''\rangle$ (7.5)
- Densité de probabilité en impulsion $P(p') = \langle p'|\sigma|p'\rangle$ (7.6)
- Normalisation $\int dp' P(p') = 1$ (7.7)

Pour passer d'une base à l'autre, on utilise les relations

$$\langle r'|p'\rangle = \frac{1}{h^{3/2}} e^{ip'r'/\hbar} \quad \int d^3r' |r'\rangle\langle r'| = \int d^3p' |p'\rangle\langle p'| = \mathbb{1} \quad (7.8)$$

qui permettent de démontrer

$$\langle r' | \sigma | r'' \rangle = \iint \frac{dp' dp''}{h^3} \langle p' | \sigma | p'' \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (p' r' - p'' r'')} \quad (7.9)$$

VII-2

② Changement de variables : représentations $\{r, u\}$ et $\{p, v\}$

Représentation $\{r, u\}$

$$\{r', r''\} \rightarrow \{r, u\} \quad \begin{cases} r = \frac{1}{2}(r' + r'') \\ u = r' - r'' \end{cases} \quad (7.10)$$

Inversement

$$\begin{cases} r' = r + \frac{u}{2} \\ r'' = r - \frac{u}{2} \end{cases} \quad (7.11)$$

- Avec les nouvelles variables, nous posons

$$F(r, u) = \langle r + \frac{u}{2} | \sigma | r - \frac{u}{2} \rangle \quad (7.12)$$

D'après (7.2)

$$R(r) = \langle r | \sigma | r \rangle = F(r, 0) \quad (7.13)$$

Représentation $\{p, v\}$

$$\{p', p''\} \rightarrow \{p, v\} \quad \begin{cases} p = \frac{1}{2}(p' + p'') \\ v = p' - p'' \end{cases} \quad (7.14)$$

Inversement

$$\begin{cases} p' = p + \frac{v}{2} \\ p'' = p - \frac{v}{2} \end{cases} \quad (7.15)$$

- Nous posons

$$G(p, v) = \langle p + \frac{v}{2} | \sigma | p - \frac{v}{2} \rangle \quad (7.16)$$

D'après (7.6)

$$P(p) = \langle p | \sigma | p \rangle = G(p, 0) \quad (7.17)$$

Passage de la représentation $\{r, u\}$ à la représentation $\{p, v\}$

Comme le jacobien de (7.14) est égal à 1 et que, d'après (7.11) et (7.15)

$$p' r' - p'' r'' = p u + r v \quad (7.18)$$

on peut réécrire (7.9) sous la forme

$$F(r, u) = \iint \frac{dp dv}{h^3} G(p, v) e^{i(pu + rv)/\hbar} \quad (7.19)$$

ce qui montre que p et u , r et v sont des variables conjuguées

③ Définition de la représentation de Wigner

a) Première manière d'introduire la représentation de Wigner

- D'après (7.13), la dépendance en r de $F(r, u)$, pour $u = 0$, donne la densité de probabilité de présence de la particule en r . D'autre part, quand $u \neq 0$, une dépendance sinusoïdale en $u = r' - r''$ est, d'après (7.4), caractéristique d'une impulsion bien définie. Ces 2 remarques suggèrent d'introduire une fonction de r et p , obtenue en prenant la transformée de Fourier de $F(r, u)$ par rapport à u

$$W(r, p) = \frac{1}{h^3} \int du F(r, u) e^{-i p u / \hbar} \quad (7.20)$$

$w(r, p)$ est, par définition la fonction de Wigner. L'inverse de (7.20) est

$$F(r, u) = \int dp W(r, p) e^{i p u / \hbar} \quad (7.21)$$

- On peut aussi, grâce à (7.19), écrire

$$W(r, p) = \frac{1}{h^3} \int dv G(p, v) e^{i r v / \hbar} \quad (7.22)$$

et la formule inverse

$$G(p, v) = \int dr W(r, p) e^{-i r v / \hbar} \quad (7.23)$$

- Comme nous l'avons déjà souligné après (7.19), il apparaît sur (7.20) VII-3
à (7.23) que p et u d'une part, r et v de l'autre sont conjugués. Ceci suggère
d'introduire une 4^{ème} fonction, $C(u, v)$, transformée de Fourier de $F(r, u)$
par rapport à r , ou encore de $G(p, v)$ par rapport à p , ou encore de
 $w(r, p)$ par rapport à r et p . Nous posons

$$C(u, v) = \iint dr dp w(r, p) e^{i(up + vr)/\hbar} \quad (7.24)$$

dont l'inverse s'écrit

$$w(r, p) = \frac{1}{h^2} \iint du dv C(u, v) e^{-i(up + vr)/\hbar} \quad (7.25)$$

Compte tenu de (7.20) et (7.22), on peut encore écrire

$$C(u, v) = \int dr F(r, u) e^{ivr/\hbar} \quad (7.26)$$

$$C(u, v) = \int dp G(p, v) e^{-iup/\hbar} \quad (7.27)$$

- Récapitulation. Le tableau I donne les couples de variables apparus
dans les 4 représentations de l'opérateur densité que nous avons
introduites ci-dessus :

$F(r, u)$, $G(p, v)$, $w(r, p)$, $C(u, v)$
Chaque flèche reliant 2 variables
conjuguées l'une de l'autre
schématise une transformation
de Fourier permettant de passer
d'une variable à l'autre

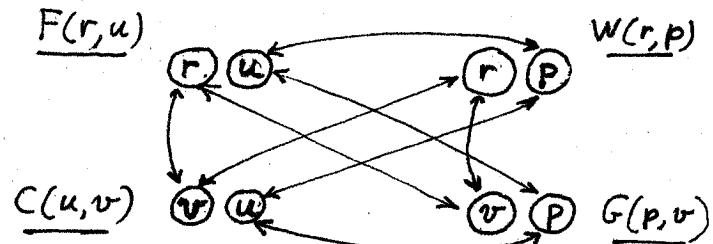


Tableau I

b) Deuxième manière d'introduire la fonction de Wigner

Cette 2^{ème} manière consiste à partir de la fonction $C(u, v)$ définie
comme la valeur moyenne, dans l'état σ , de l'opérateur $e^{i[uP + vR]/\hbar}$

$$C(u, v) = \text{Tr} \{ \sigma e^{i[uP + vR]/\hbar} \} = \langle e^{i[uP + vR]/\hbar} \rangle \quad (7.28)$$

puis à introduire $w(r, p)$ comme double transformée de Fourier de $C(u, v)$
par rapport à u et v [formule identique à (7.25)]. On montre, dans
l'appendice A, que la fonction $C(u, v)$ définie en (7.28) coïncide avec la
fonction $C(u, v)$ introduite dans le § a précédent [par exemple en (7.26)]

L'intérêt de cette 2^{ème} définition (7.28) est que $C(u, v)$ ressemble
à une "fonction caractéristique" de 2 variables R et P non commutantes
avec carrature, ce qui fait alors apparaître la double transformée de
Fourier, $w(r, p)$, de $C(u, v)$, comme une sorte de densité de probabilité
de r et p . Il ne faut pas oublier cependant que R et P sont des
opérateurs qui ne commutent pas, de sorte qu'on pourrait introduire
tout aussi valablement d'autres "fonctions caractéristiques" comme

$$\langle e^{iup/\hbar} e^{ivr/\hbar} \rangle \quad \text{ou} \quad \langle e^{ivr/\hbar} e^{iup/\hbar} \rangle \quad (7.29)$$

différentes, l'une de l'autre, et différentes chacune de (7.28). On
pourrait également remplacer R et P par des combinaisons linéaires
d'opérateurs de création et d'annihilation a^+ et a et introduire
d'autres "fonctions caractéristiques" où a et a^+ sont rangés dans l'ordre
normal ou antinormal [voir cours 1974-75 cours IV]. L'intérêt
du choix (7.28) est qu'il est bien adapté au calcul des valeurs
moyennes de fonctions de R et P , symétrisées en R et P (voir plus loin p. IV.4)

④ Propriétés de la fonction de Wigner

VII-4

a) Ressemblances avec une densité de probabilité

Réalité Changeons u en $-u$ dans (7.12) et utilisons l'hermiticité de l'opérateur densité σ . Il vient

$$F(r, u) = F(r, -u)^* \quad (7.30)$$

Il découle alors de (7.20) et (7.30) que

$$w(r, p) = w(r, p)^* \quad (7.31)$$

Intégrale sur r , intégrale sur p , intégrale sur r et p

- Faisons $u=0$ dans (7.21), $v=0$ dans (7.23) et utilisons (7.13) et (7.17). Il vient

$$\int dp w(r, p) = F(r, 0) = R(r) \quad (7.32)$$

$$\int dr w(r, p) = G(p, 0) = P(p) \quad (7.33)$$

L'intégrale sur p de $w(r, p)$ donne la densité de probabilité en r
L'intégrale sur r de $w(r, p)$ donne la densité de probabilité en p

- Comme $R(r)$ et $P(p)$ sont normées ($\text{Tr } \sigma = 1$), on en déduit que $w(r, p)$ est normée :

$$\iint dr dp w(r, p) = 1 \quad (7.34)$$

Valeurs moyennes de fonctions symétrisées de R et P

- Développons en série l'exponentielle de (7.28), et prenons le terme en $u^2 v$ du développement ainsi obtenu

$$C(u, v) = \dots + u^2 v \frac{1}{3!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^3 \langle (P^2 R + P R P + R P^2) \rangle + \dots \quad (7.35)$$

On voit apparaître la valeur moyenne de l'opérateur $P^2 R$ symétrisé en R et P . Il découle de (7.35) que

$$\left(\frac{\hbar}{i}\right)^3 \frac{\partial^2}{\partial u^2} \frac{\partial}{\partial v} C(u, v) \Big|_{u=0=v} = \frac{1}{3} \langle (P^2 R + P R P + R P^2) \rangle \quad (7.36)$$

- Or, d'après (7.24)

$$\left(\frac{\hbar}{i}\right)^3 \frac{\partial^2}{\partial u^2} \frac{\partial}{\partial v} C(u, v) \Big|_{u=0=v} = \iint dr dp p^2 r w(r, p) \quad (7.37)$$

On en déduit

$$\left\langle \frac{1}{3} (P^2 R + P R P + R P^2) \right\rangle = \iint dr dp p^2 r w(r, p) \quad (7.38)$$

Ce résultat se généralise aisément : pour calculer la valeur moyenne d'une fonction symétrisée des opérateurs R et P , il suffit de multiplier la fonction classique correspondante de r et p [qui n'a pas besoin, elle, d'être symétrisée car r et p sont alors des variables classiques] par $w(r, p)$, et d'intégrer sur r et p

b) Différences avec une densité de probabilité

$w(r, p)$ peut prendre des valeurs négatives

- Supposons que l'opérateur densité σ correspond à un cas pur ($\sigma = |\psi\rangle\langle\psi|$), et que la fonction d'onde $\psi(r)$ associée à $|\psi\rangle$ ait l'allure représentée sur la figure 1 : 2 fonctions de supports disjoints, l'une positive autour de $r=a$, l'autre négative autour de $r=-a$. Par exemple, $\psi(r)$ peut être une combinaison linéaire, antisymétrique, de 2 fonctions d'onde localisées dans 2 puits de potentiel symétriques par rapport à 0 et séparés par une barrière de potentiel

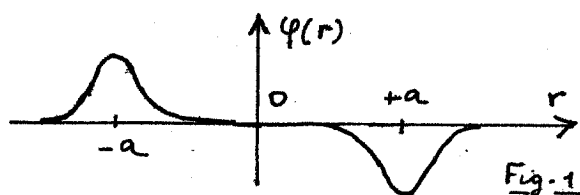


Fig. 1

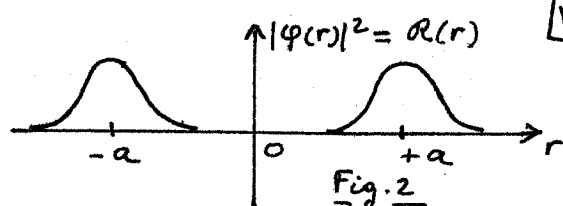


Fig. 2

- La densité de probabilité $|\varphi(r)|^2$ associée à $\varphi(r)$ a l'allure représentée sur la figure 2. Elle est toujours positive et exprime que la particule a une certaine probabilité d'être dans 2 régions disjointes de l'espace.
- De (7.12), on déduit (comme φ est réelle)

$$F(r, u) = \langle r + \frac{u}{2} | \varphi \rangle \langle \varphi | r - \frac{u}{2} \rangle = \varphi(r + \frac{u}{2}) \varphi(r - \frac{u}{2}) \quad (7.39)$$

et par suite, d'après (7.20)

$$w(r, p=0) = \frac{1}{h^3} \int du \varphi(r + \frac{u}{2}) \varphi(r - \frac{u}{2}) \quad (7.40)$$

L'allure des variations de $w(r, p=0)$ avec r est représentée sur la figure 3. Au voisinage de $r=0$, on voit, en prenant u de l'ordre de $2a$ dans l'intégrale (7.40), que $w(r, p=0)$ prend des valeurs négatives. Ceci est dû au fait que $F(r, u)$ est le produit des valeurs de la fonction d'onde en 2 points différents, où ces valeurs peuvent être de signe opposé.

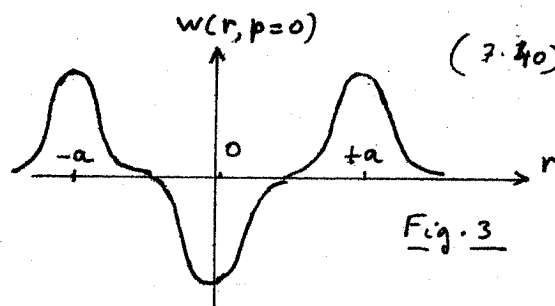


Fig. 3

$w(r, p)$ peut prendre des valeurs non nulles en des points où $R(r) = 0$

Il apparaît clairement sur la figure 3 qu'au voisinage de $r=0$ $w(r, p=0)$ est différent de 0, alors que la vraie densité de probabilité en r , $R(r)$, représentée sur la figure 2, est nulle. La non localité de la relation entre $F(r, u)$ et $\varphi(r)$ fait donc apparaître des densités "fantômes" en des points où l'on est sûr que la particule ne peut se trouver. Par exemple, dans une expérience d'interférences, immédiatement après la traversée de l'écran percé de 2 fentes, $w(r, 0)$ est non nul dans une région située à mi-distance des 2 fentes.

$w(r, p)$ ne peut pas être infiniment bien localisé

En prenant toujours l'exemple d'un cas pur $\varphi(r)$, on peut écrire

$$w(r, p) = \frac{1}{h^3} \int du \varphi^*(r + \frac{u}{2}) \varphi(r - \frac{u}{2}) e^{-ip u / \hbar} \quad (7.41)$$

ce qui fait apparaître $w(r, p)$ comme le produit scalaire (en u) de $\varphi(r + \frac{u}{2})$ et $\varphi(r - \frac{u}{2}) e^{-ip u / \hbar}$. L'inégalité de Schwarz donne alors

$$|w(r, p)|^2 \leq \frac{1}{h^6} \int du |\varphi(r + \frac{u}{2})|^2 \times \int du' |\varphi(r - \frac{u'}{2})|^2 = \left(\frac{2}{h}\right)^6 \quad (7.42)$$

et donc

$$|w(r, p)| < \left(\frac{2}{h}\right)^3 \quad (7.43)$$

inégalité qui se généralise aisément à un mélange statistique d'états. Comme w est normée [voir 7.34], on en déduit que $w(r, p)$ est nécessairement non nul dans un volume au moins égal à $(h/2)^3$. Ceci ne fait d'ailleurs que traduire la relation d'incertitude entre R et P .

Les valeurs moyennes des fonctions non symétrisées de R et P ne s'expriment pas simplement en fonction de $w(r, p)$. Par exemple

$$\langle RP \rangle = \frac{1}{2} \langle RP + PR \rangle + \frac{1}{2} \langle RP - PR \rangle = \iint dr dp r p w(r, p) + \frac{i\hbar}{2} \quad (7.44)$$

⑤ Particule dans un potentiel. Evolution de la fonction de Wigner VII-6

a) Vitesse de variations due à l'énergie cinétique

$$- \quad i\hbar \dot{\sigma} = \left[\frac{P^2}{2M}, \sigma \right] \quad (7.45)$$

Comme P est diagonal dans la base $\{|p\rangle\}$, on a intérêt à prendre l'élément de matrice de (7.45) entre $\langle p'|$ et $|p''\rangle$

$$\dot{\sigma}(p', p'') = \frac{1}{i\hbar 2M} (p'^2 - p''^2) \sigma(p', p'') \quad (7.46)$$

- Effectuons alors le changement de variables (7.14). Il vient

$$\dot{G}(p, v) = \frac{1}{i\hbar M} p v G(p, v) \quad (7.47)$$

- Pour obtenir $\dot{w}(r, p)$ il faut prendre la transformée de Fourier des 2 membres de (7.47) par rapport à v . Comme la multiplication par v devient dans une telle opération $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}$ [voir 7.22 et 7.23], on a

$$\dot{w}(r, p) = - \frac{p}{M} \frac{\partial}{\partial r} w(r, p) \quad (7.48)$$

On retrouve le terme de vol libre introduit dans le cours VI (cf 6.14)

b) Vitesse de variations due à l'énergie potentielle. Développement en puissances de $\hbar$

$$- \quad i\hbar \dot{\sigma} = [V(R), \sigma] \quad (7.49)$$

Comme R est diagonal dans la base $\{|r\rangle\}$, on a intérêt à prendre l'élément de matrice de (7.49) entre $\langle r'|$ et $|r''\rangle$

$$\dot{\sigma}(r', r'') = \frac{1}{i\hbar} [V(r') - V(r'')] \sigma(r', r'') \quad (7.50)$$

- Effectuons alors le changement de variables (7.10). Il vient

$$\dot{F}(r, u) = \frac{1}{i\hbar} \left[V(r + \frac{u}{2}) - V(r - \frac{u}{2}) \right] F(r, u) \quad (7.51)$$

- Une première possibilité pour interpréter le contenu physique de (7.51) consiste à développer $V(r \pm \frac{u}{2})$ en puissances de u . Comme le crochet de (7.51) est impair en u , seules les puissances impaires de u apparaissent dans le développement de ce crochet

$$V(r + \frac{u}{2}) - V(r - \frac{u}{2}) = u \frac{dV(r)}{dr} + \frac{u^3}{24} \frac{d^3V(r)}{dr^3} + \dots \quad (7.52)$$

En faisant apparaître la force $\phi(r)$ associée à $V(r)$

$$\phi(r) = - \frac{dV(r)}{dr} \quad (7.53)$$

et en reportant (7.52) dans (7.51), on obtient

$$\dot{F}(r, u) = \frac{1}{i\hbar} \left[-u \phi(r) F(r, u) + \frac{u^3}{24} \frac{d^3V(r)}{dr^3} F(r, u) + \dots \right] \quad (7.54)$$

Il ne reste plus qu'à prendre la transformée de Fourier des 2 membres de (7.54) par rapport à u . Comme la multiplication par u devient dans une telle opération $i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$ [voir 7.20 et 7.21], il vient

$$\dot{w}(r, p) = - \phi(r) \frac{\partial}{\partial p} w(r, p) - \frac{\hbar^2}{24} \frac{d^3V(r)}{dr^3} \frac{\partial^3}{\partial p^3} w(r, p) + \dots \quad (7.55)$$

Finalement, en ajoutant les vitesses de variation (7.48) et (7.55), on obtient

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{M} \frac{\partial}{\partial r} + \phi(r) \frac{\partial}{\partial p} \right] w(r, p, t) = - \frac{\hbar^2}{24} \frac{d^3V(r)}{dr^3} \frac{\partial^3}{\partial p^3} w(r, p, t) + \dots \quad (7.56)$$

équation qui ressemble beaucoup à l'équation de Fokker-Planck (6.14) du cours VI. Le 1^{er} membre décrit l'évolution d'une distribution classique (évolution conservative). Le 2nd membre décrit des corrections quantiques sous forme d'un

développement en puissances de $\hbar^2$

VII-7

Notons que si $V(r)$ est quadratique en r (cas d'un potentiel linéaire ou parabolique), tous les termes du second membre de (7.56) sont nuls. Il n'y a alors pas de différence entre l'équation d'évolution de la fonction de Wigner et celle d'une distribution classique. Il ne faut pas oublier cependant que w est soumis à des contraintes liées à la non commutation de R et P (voir § 4 b ci-dessus)

c) Analogies avec une équation pilote. Différences

- Revenons à (7.51). Au lieu de développer $V(r \pm \frac{u}{2})$ en puissances de u , on peut considérer que chacun des 2 termes $V(r + \frac{u}{2}) F(r, u)$ et $-V(r - \frac{u}{2}) F(r, u)$ figurant au 2^{ème} membre de (7.51) est un produit de 2 fonctions de u , qui, par transformée de Fourier par rapport à u , va devenir un produit de convolution de $w(r, p)$ par la transformée de Fourier de $V(r - \frac{u}{2})$. On obtient ainsi, à partir de (7.51)

$$\dot{w}(r, p) = \int dp' S(r, p-p') w(r, p') \quad (7.57)$$

$$\text{ou} \quad S(r, p) = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{h^3} \int du e^{-ip u / \hbar} [V(r + \frac{u}{2}) - V(r - \frac{u}{2})] \\ = -\frac{2}{\hbar} \frac{1}{h^3} \int du \sin \frac{p u}{\hbar} V(r + \frac{u}{2}) \quad (7.58)$$

- En ajoutant les vitesses de variations (7.48) et (7.58), on obtient

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial r} \right) w(r, p, t) = \int dp' S(r, p-p') w(r, p', t) \quad (7.58)$$

En plus du vol libre, l'évolution de $w(r, p, t)$ décrite par (7.58) peut être "interprétée" de la manière suivante : Tout se passe comme si, sous l'effet du potentiel, la particule au point r effectuait des "sauts d'impulsion" $p-p'$ avec des "probabilités" par unité de temps $S(r, p-p')$. L'équation (7.58) apparaît ainsi comme une "équation pilote".

- En faveur de cette interprétation, on peut noter que, d'après la 1^{ère} ligne de (7.58), $S(r, p)$ est une quantité réelle. De plus, en multipliant $S(r, p)$ par p , et en intégrant sur p , on obtient le "transfert moyen d'impulsion par unité de temps au point r ". Comme

$$\frac{1}{h^3} \int dp p e^{-ip u / \hbar} = i\hbar \frac{\partial}{\partial u} \frac{1}{h^3} \int du e^{-ip u / \hbar} = i\hbar \delta'(u) \quad (7.59)$$

on obtient

$$\int dp p S(r, p) = \int du S'(u) [V(r + \frac{u}{2}) - V(r - \frac{u}{2})] = -\frac{dV}{dr} = \phi(r) \quad (7.60)$$

résultat satisfaisant physiquement puisqu'il fait apparaître la force au point r comme le transfert moyen d'impulsion par unité de temps au point r

- En défaveur de cette interprétation, notons que d'après (7.58), $S(r, p)$ est une fonction impair de p , dont l'intégrale est donc nulle. $S(r, p)$ prend donc nécessairement des valeurs négatives, ce qui montre que ce n'est pas une vraie probabilité. De plus, elle n'est pas normalisée.

Notons enfin que, $S(r, p)$ étant impaire, la "valeur moyenne" de p^2 est nulle. Il n'y a donc pas de diffusion d'impulsion associée à l'équation (7.58)

d) Propagateur de la fonction de Wigner

VII-8

- L'évolution de la fonction de Wigner peut être décrite d'une 3^{ème} manière [en plus de (7.56) et (7.58)] qui rappelle, par certains côtés, l'évolution d'un processus de Markov (voir cours V)
- Partons de l'équation d'évolution de l'opérateur densité qui permet d'exprimer $\sigma(t_1)$ en fonction de $\sigma(t_0)$, et de l'opérateur d'évolution $U(t_1, t_0)$

$$\sigma(t_1) = U(t_1, t_0) \sigma(t_0) U^\dagger(t_1, t_0) \quad (7.61)$$

$$U(t_1, t_0) = e^{-iH(t_1-t_0)/\hbar} \quad H = \frac{P^2}{2m} + V(R) \quad (7.62)$$

En prenant les éléments de matrice des 2 membres de (7.61) entre $\langle r'_1 |$ et $| r''_1 \rangle$ et en insérant des relations de fermeture entre U et σ , σ et $U^\dagger$, on obtient

$$\sigma(r'_1, r''_1, t_1) = \iint dr'_0 dr''_0 \sigma(r'_0, r''_0, t_0) K(r'_0, t_0 | r'_1, t_1) K^*(r''_0, t_0 | r''_1, t_1) \quad (7.63)$$

où $K(r'_0, t_0 | r'_1, t_1) = \langle r'_1 | U(t_1, t_0) | r'_0 \rangle \quad (7.64)$

est l'amplitude de transition $r'_0, t_0 \rightarrow r'_1, t_1$. A partir des propriétés de l'opérateur d'évolution $U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1) U(t_1, t_0)$ et $U^\dagger(t_1, t_0) = U(t_0, t_1)$, on démontre que

$$\int dr'_1 K(r'_0, t_0 | r'_1, t_1) K(r'_1, t_1 | r'_2, t_2) = K(r'_0, t_0 | r'_2, t_2) \quad (7.65)$$

$$K(r'_0, t_0 | r'_1, t_1) = K(r'_1, t_1 | r'_0, t_0)^* \quad (7.66)$$

$$K(r'_0, t_0 | r''_0, t_0) = \delta(r'_0 - r''_0) \quad (7.67)$$

L'équation (7.65) ressemble un peu à une équation de Smoluchowski pour la probabilité de transition d'un processus de Markov [équation 5.9 de V], mais il ne faut pas oublier que K est une amplitude complexe et non une probabilité

- Effectuons le changement de variables (7.10). L'équation (7.63) devient

$$F(r_1, u_1, t_1) = \iint dr_0 du_0 F(r_0, u_0, t_0) T(r_0, u_0, t_0 | r_1, u_1, t_1) \quad (7.68)$$

où $T(r_0, u_0, t_0 | r_1, u_1, t_1) = K(r_0 + \frac{u_0}{2}, t_0 | r_1 + \frac{u_1}{2}, t_1) K(r_0 - \frac{u_0}{2}, t_0 | r_1 - \frac{u_1}{2}, t_1)^* \quad (7.69)$

satisfait $T(r_0, -u_0, t_0 | r_1, -u_1, t_1) = T(r_0, u_0, t_0 | r_1, u_1, t_1)^* \quad (7.70)$

- Il ne reste plus qu'à prendre la transformée de Fourier des 2 membres de (7.68) par rapport à u_1 , et à exprimer $F(r_0, u_0, t_0)$ en fonction de $w(r_0, p_0, t_0)$ pour obtenir

$$w(r_1, p_1, t_1) = \iint dr_0 dp_0 w(r_0, p_0, t_0) S(r_0, p_0, t_0 | r_1, p_1, t_1) \quad (7.71)$$

où $S(r_0, p_0, t_0 | r_1, p_1, t_1) = \frac{1}{h^3} \iint du_0 du_1 T(r_0, u_0, t_0 | r_1, u_1, t_1) e^{i(p_0 u_0 - p_1 u_1)/\hbar} \quad (7.72)$

apparaît comme le propagateur de la fonction de Wigner et a la signification d'une "probabilité de transition" $r_0, p_0, t_0 \rightarrow r_1, p_1, t_1$

A partir des définitions (7.72) et (7.69) et des propriétés (7.65) à (7.67) (7.70) on démontre alors les propriétés suivantes pour S

(i) $S(r_0, p_0, t_0 | r_1, p_1, t_1)$ réel (7.73)

(ii) $S(r_0, p_0, t_0 | r'_0, p'_0, t_0) = \delta(r_0 - r'_0) \delta(p_0 - p'_0)$ (7.74)

(iii) $\iint dr_i dp_i S(r_0, p_0, t_0 | r_i, p_i, t_i) S(r_i, p_i, t_i | r_2, p_2, t_2) = S(r_0, p_0, t_0 | r_2, p_2, t_2)$ (7.75)

(iv) $\iint dr_i dp_i S(r_0, p_0, t_0 | r_i, p_i, t_i) = 1$ (7.76)

Toutes ces propriétés rappellent beaucoup celles de la probabilité de transition d'un processus de Markov. En particulier l'équation (7.75) rappelle l'équation de Smoluchowski 5.9 du chapitre V. S peut cependant prendre des valeurs négatives, ce qui montre bien que, malgré ses apparences classiques, w reste un objet quantique.

Références

[VII-9]

- C. Tanguy : Thèse de 3^{ème} cycle, Paris 1983
 C. Lhuillier : Séminaire au Collège de France, Paris 1981
 S. de Groot : La transformation de Weyl et la fonction de Wigner : une forme alternative de la mécanique quantique, Les Presses de l'Université de Montréal (1974)
 T. Takabayasi : Progress of Theoret. Phys. 11, 341 (1954)

Appendice A

Démontrons que la fonction $C(u, v)$ définie par (7.26) coïncide avec (7.28)

$$C(u, v) = \int dr F(r, u) e^{i v r / \hbar} = \int dr \langle r + \frac{u}{2} | \sigma | r - \frac{u}{2} \rangle e^{i v r / \hbar} \quad (A-1)$$

Reexprimons $|r - \frac{u}{2}\rangle$ en fonction de $|r + \frac{u}{2}\rangle$ et de l'opérateur de translation $e^{i u P / \hbar}$

$$|r - \frac{u}{2}\rangle = e^{i u P / \hbar} |r + \frac{u}{2}\rangle \quad (A-2)$$

Par ailleurs

$$e^{i v R / \hbar} |r + \frac{u}{2}\rangle = e^{i v r / \hbar} e^{i v u / 2 \hbar} |r + \frac{u}{2}\rangle \quad (A-3)$$

En utilisant (A-2) et (A-3), on peut alors réécrire (A-1) sous la forme

$$C(u, v) = \int dr \langle r + \frac{u}{2} | \sigma e^{i u P / \hbar} e^{i v R / \hbar} | r + \frac{u}{2} \rangle e^{-i v u / 2 \hbar} \quad (A-4)$$

Or, si A et B commutent avec $[A, B]$, il est bien connu que

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A, B]} \quad (A-5)$$

de sorte que

$$e^{i u P / \hbar} e^{i v R / \hbar} = e^{i [u P + v R] / \hbar} e^{i u v / 2 \hbar} \quad (A-6)$$

En reportant (A-6) dans (A-4), on obtient

$$\begin{aligned} C(u, v) &= \int dr \langle r + \frac{u}{2} | \sigma e^{i [u P + v R] / \hbar} | r + \frac{u}{2} \rangle \\ &= \text{Tr} \{ \sigma e^{i [u P + v R] / \hbar} \} = \langle e^{i [u P + v R] / \hbar} \rangle \end{aligned} \quad (A-7)$$

ce qui démontre (7.28)