

Approche géométrique de la limite semi-classique par les états cohérents.

F. Faure et R. Arvieu
Institut des Sciences Nucléaires, 38026 Grenoble

I) Introduction

Depuis les débuts de la mécanique quantique jusqu'à nos jours, les physiciens cherchent à décrire des correspondances entre les lois d'évolution quantiques et les lois d'évolution classiques correspondantes (leur limite classique) pour des systèmes à peu de degrés de liberté. Très tôt les règles de quantification E.B.K. (Einstein-Brillouin-Keller) et la théorie W.K.B. (Wentzel-Kramers-Brillouin) ont permis de comprendre ces correspondances dans le cas où la limite classique est intégrable, et depuis peu des études principalement à l'aide de la formule de Gutzwiller ou d'observations statistiques du spectre, éclairent le cas contraire, où la dynamique classique est chaotique ou mixte [1]. L'objet de cette communication est de montrer que les états cohérents (qui sont des paquets d'ondes gaussiens) sont des états quantiques qui conviennent assez naturellement pour envisager cette correspondance. Nous allons voir comment cette approche peut se faire de façon géométrique. Les états cohérents sont largement étudiés et utilisés dans beaucoup de domaines de la physique où intervient la mécanique quantique (en optique quantique, en physique atomique et moléculaire, en physique nucléaire, en théorie des champs ...), et particulièrement dans ce contexte du problème de la limite semi-classique [2, 3]. Dans la première partie nous allons considérer séparément les formalismes de la mécanique quantique et de la mécanique classique, et voir quelle description géométrique est adaptée à chacune d'elle.

II) Formalismes quantique et classique pour un système à un degré de liberté

a) Mécanique quantique:

Les objets qui évoluent sous la dynamique sont des fonctions d'ondes $\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$; et en notation de Dirac, une telle fonction $\Psi(q)$ est considérée comme étant les composantes d'un vecteur $|\Psi\rangle$ dans la base particulière des états de position $|q\rangle$: $\Psi(q) = \langle q|\Psi\rangle$

L'équation de Schrödinger détermine l'évolution de ces vecteurs sous l'action du Hamiltonien \hat{H} , opérateur hermitique:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (1)$$

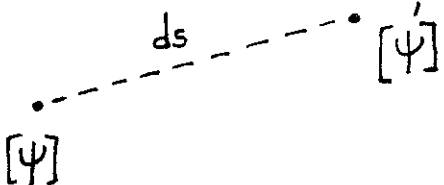
Cette équation peut s'intégrer sur une durée t :

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) |\Psi(0)\rangle \quad (2)$$

et l'opérateur $U_t = \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)$ appelé propagateur est unitaire. L'équation de Schrödinger étant linéaire, la dynamique est caractérisée par l'ensemble des vecteurs propres $|\Psi_n\rangle$ (états stationnaires) et des valeurs propres E_n (énergies) de \hat{H} :

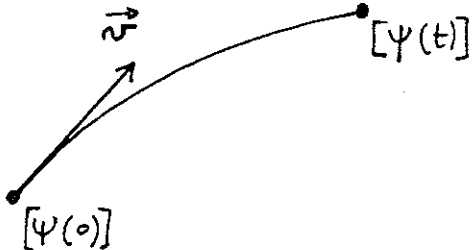
$$\hat{H} |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle \quad (3)$$

On peut considérer cette dynamique de façon géométrique, dans l'espace des états quantiques qui est l'espace projectif de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Deux fonctions d'ondes Ψ_1, Ψ_2 correspondent au même état $[\Psi]$ si elles sont proportionnelles, $\Psi_1 = \lambda \Psi_2, \lambda \in \mathbb{C}$, c'est à dire si elles donnent les mêmes résultats de mesure avec toutes les observables. Cet espace est un espace métrique, de dimension infinie, et de diamètre fini. La distance infinitésimale entre deux états voisins $[\Psi]$ et $[\Psi']$ représentés par des vecteurs normalisés $|\Psi\rangle$ et $|\Psi'\rangle$, est:

$$ds^2 = 4 \left(1 - |\langle \Psi | \Psi' \rangle|^2 \right) \quad (4)$$


Intuitivement, deux états proches donnent des résultats voisins avec toutes les observables possibles, ou encore le recouvrement de leur fonction d'onde est presque maximum.

L'évolution quantique du vecteur $|\Psi(t)\rangle$ correspond à une trajectoire $[\Psi(t)]$ dans cet espace. J.Anandan et Y.Aharonov [4] ont récemment montré que la vitesse d'évolution sur cette trajectoire est constante et de norme proportionnelle à l'incertitude en énergie de l'état:

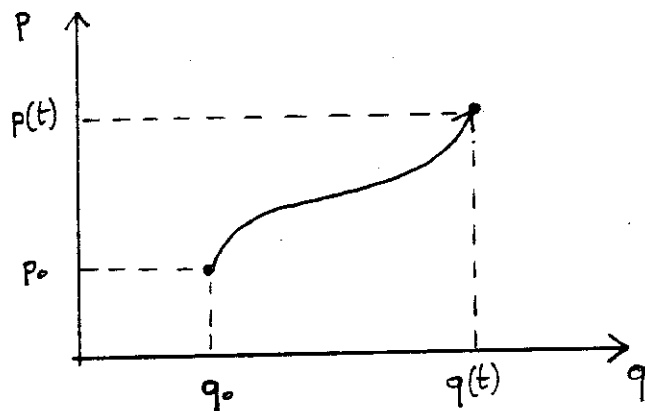
$$v = \frac{\Delta E}{\hbar} \quad (5)$$


On peut vérifier que les états propres d'énergie ($\Delta E = 0$) sont effectivement stationnaires. Ce sont les points fixes de cette dynamique.

b) Mécanique classique:

Elle décrit l'évolution d'un point de coordonnées (q, p) appartenant à l'espace de phase (ici de dimension deux pour un système à un degré de liberté), par les équations de Hamilton [5]:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}q(t) = \frac{\partial}{\partial p}\mathcal{H}(q, p) \\ \frac{d}{dt}p(t) = -\frac{\partial}{\partial q}\mathcal{H}(q, p) \end{cases} \quad (6)$$



La fonction $\mathcal{H}(q, p)$ est le Hamiltonien classique. Dans la suite on verra que les états cohérents

permettent d'inclure l'espace de phase classique dans l'espace des états quantiques et ainsi d'envisager la dynamique classique comme une approximation de la dynamique quantique.

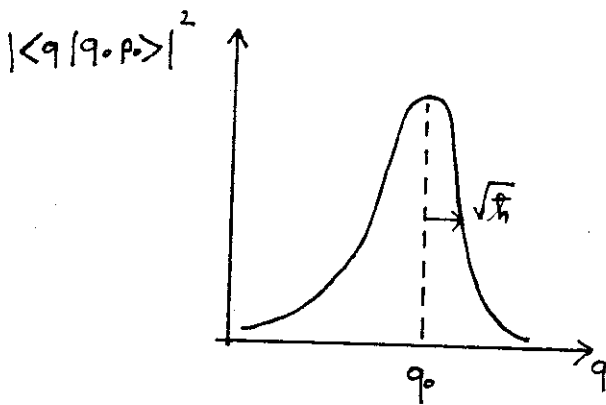
Il faut noter que l'on peut considérer séparément deux limites pour la dynamique quantique, $\hbar \rightarrow 0$ et $t \rightarrow +\infty$: A t fixé, et à la limite $\hbar \rightarrow 0$, on obtient la limite classique du propagateur, et donc un comportement classique de la dynamique. A \hbar fixé et à la limite $t \rightarrow +\infty$, on est amené à considérer les états stationnaires et le spectre quantique qui sont invariants par rapport au temps.

Sauf dans le cas intégrable, ces deux limites ne commutent pas, c'est à dire que l'on ne peut pas faire correspondre une structure invariante classique comme une orbite périodique par exemple, à un état stationnaire pour la limite $\hbar \rightarrow 0$. La formule de Guztwiller montre qu'au contraire, pour obtenir le spectre, plusieurs orbites périodiques participent globalement. On abordera ce problème en dernière partie.

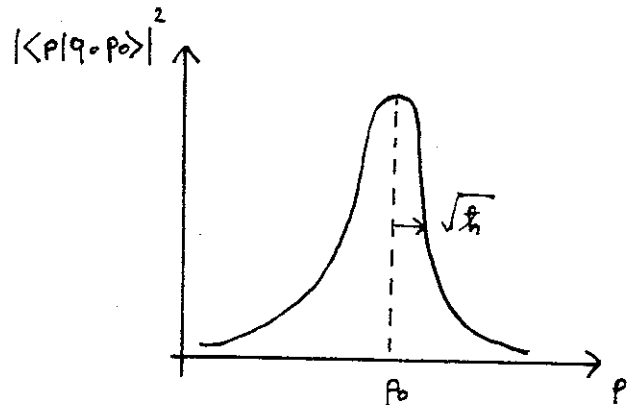
II) Etats cohérents, représentation de Husimi.

L'intérêt de base des états cohérents est que ce sont des états quantiques $[q_0, p_0]$ dont chacun est naturellement associé à un point de l'espace de phase classique (q_0, p_0) . L'état fondamental de l'oscillateur harmonique $|0\rangle$ est une gaussienne $\Psi_0(q) = \langle q|0\rangle \propto \exp(-\frac{q^2}{\hbar})$, de valeurs moyennes nulles en position et impulsion et d'incertitude minimale $\Delta q = \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}$. On obtient de façon générale un vecteur cohérent $|q_0, p_0\rangle$ de valeurs moyennes $q_0 = \langle q_0, p_0|\hat{q}|q_0, p_0\rangle$ et $p_0 = \langle q_0, p_0|\hat{p}|q_0, p_0\rangle$ et d'incertitude minimale $\Delta q = \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}$ par translation du vecteur $|0\rangle$ [6], (chap. GV, p.560):

$$|q_0, p_0\rangle = e^{\frac{iq_0 p_0}{\hbar}} e^{-\frac{i\hat{p}q_0}{\hbar}} |0\rangle \quad (7)$$



Représentation "q"



Représentation "p"

Remarque: on obtient une expression plus pratique pour les états cohérents à l'aide des opérateurs a et a^+ :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\hat{q} + i\hat{p}) \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\hat{q} - i\hat{p}) \quad (8)$$

alors:

$$|q_0, p_0\rangle \propto |z\rangle = e^{za^+} |0\rangle \quad (9)$$

avec $z = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(q_0 + ip_0) \in \mathbb{C}$ Ainsi les états cohérents ont une dépendance analytique en z (et beaucoup de propriétés en découlent [7, 8]) et l'espace de phase classique $(q, p) \in \mathbb{R}^2$ est identifié au plan complexe $z \in \mathbb{C}$.

Représentation de Husimi:

La famille $|q_0, p_0\rangle$ forme une base surcomplète de l'espace de Hilbert, et sert de base de représentation: à un vecteur quantique $|\Psi\rangle$ on associe une fonction positive sur l'espace de phase (q, p) appelée distribution de Husimi de l'état $|\Psi\rangle$ [9] :

$$\mathcal{H}_\Psi(q, p) = |\langle q, p | \Psi \rangle|^2 \quad (10)$$

Il n'est pas tout à fait exact d'interpréter cette fonction comme une distribution de probabilité sur l'espace de phase car les états cohérents (états de base) ne sont pas orthogonaux entre eux. Mais ils le deviennent à la limite classique $\hbar \rightarrow 0$ si bien qu'il y a beaucoup de similitudes entre la distribution quantique de Husimi et la distribution classique de Liouville. En particulier la distribution de Husimi d'un état cohérent $|q_0, p_0\rangle$ est:

$$\mathcal{H}_{q_0, p_0}(q, p) = e^{-\frac{1}{\hbar}((q-q_0)^2 + (p-p_0)^2)} \quad (11)$$

C'est donc une gaussienne circulaire, de centre (q_0, p_0) et de largeur $\sim \sqrt{\hbar}$.

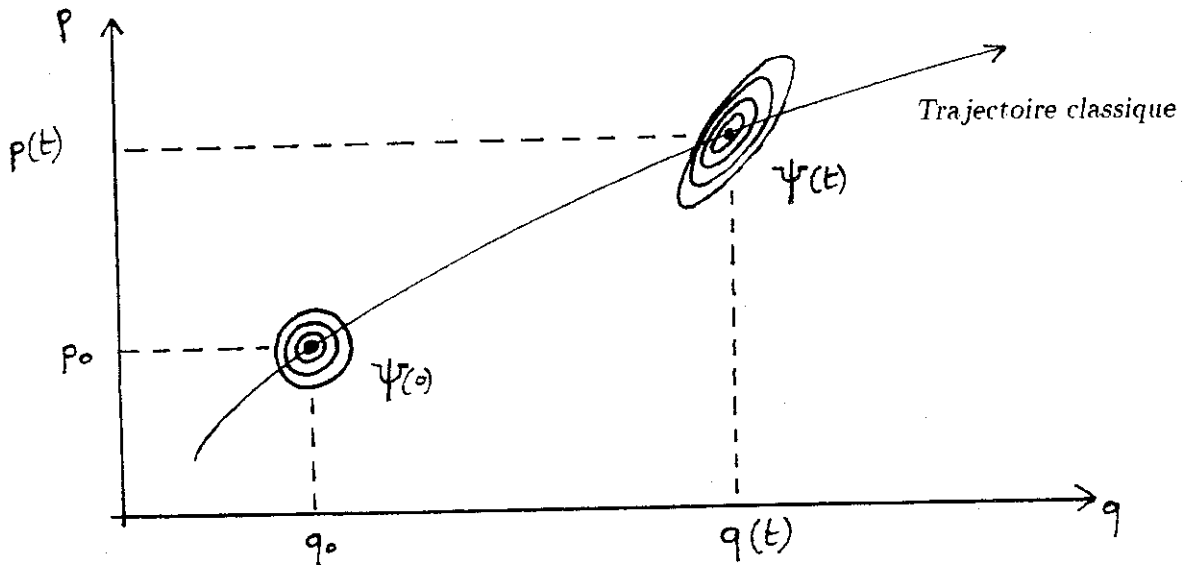
III) Evolution avec le Hamiltonien \hat{H}

Etant donné un Hamiltonien \hat{H} (par exemple $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\hat{q})$), on s'intéresse à l'évolution d'un état cohérent :

$$|\Psi(0)\rangle = |q_0, p_0\rangle \quad (12)$$

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} |\Psi(0)\rangle \quad (13)$$

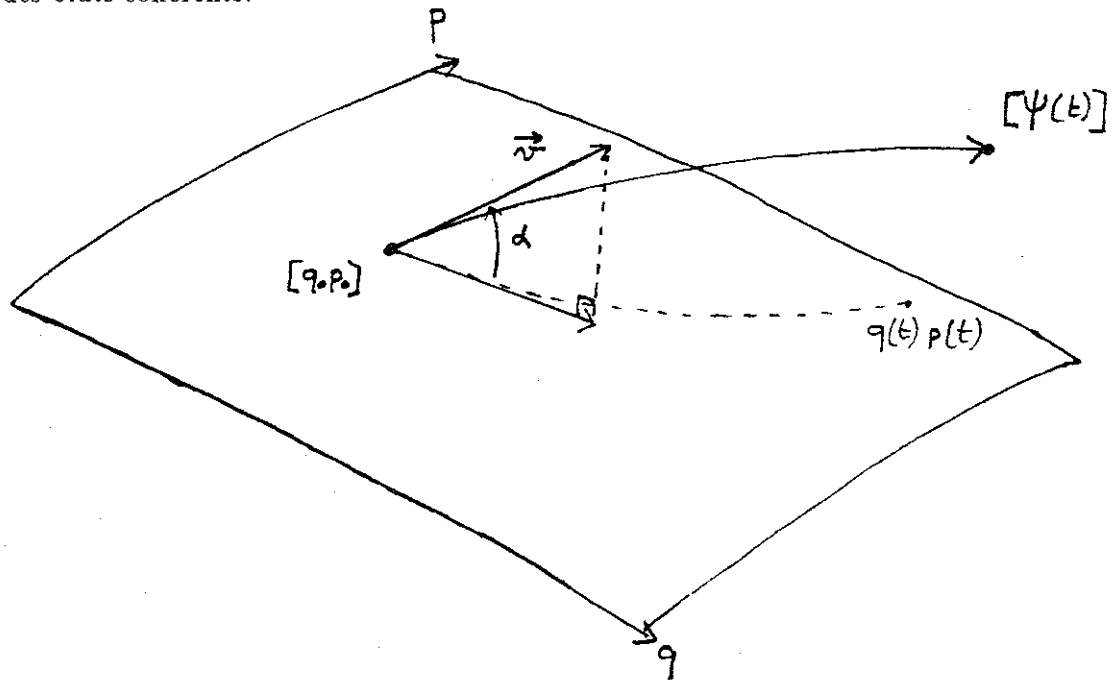
Numériquement, si observe la distribution de Husimi de $|\Psi(t)\rangle$ à t fixé et pour $\hbar \rightarrow 0$, on s'aperçoit que la distribution s'est déplacée le long de la trajectoire classique passant par (q_0, p_0) et simultanément s'est étalée de façon elliptique avec une taille de l'ordre de $\sqrt{\hbar}$. Il faut noter que à cause de l'étalement, l'état $|\Psi(t)\rangle$ n'est plus un état cohérent pour $t \neq 0$.



Lignes de niveau des représentations des distributions de Husimi de $|\Psi(0)\rangle$ et $|\Psi(t)\rangle$.

Pour comprendre tout d'abord ce déplacement (qui est l'effet principal subi par la distribution), il faut approximer l'état $[\Psi(t)]$ par un état cohérent $[q(t), p(t)]$ en négligeant la déformation. Pour ce faire, il y a différentes méthodes équivalentes: Effectuer un développement limité dans l'équation de Schrödinger [10], ou appliquer le principe variationnel dépendant du temps, ou faire l'approximation de la phase stationnaire dans l'intégrale de chemin, ou encore projeter la trajectoire quantique dans l'espace des états sur la famille des états cohérents. Nous allons présenter cette dernière description géométrique.

La famille des états cohérents $[q, p]$ forme une surface de dimension deux incluse dans l'espace des états dont on a parlé au paragraphe I). L'état cohérent initial $[q_0, p_0]$ appartient à cette surface, et son évolution quantique $[\Psi(t)]$ suit une trajectoire à la vitesse \vec{v} qui sort de cette surface. Une approximation naturelle est donc de projeter ce vecteur \vec{v} orthogonalement sur la surface des états cohérents:



En faisant cette opération pour chaque état cohérent $[q_0, p_0]$, on obtient un champ de vecteur sur la surface qui définit des trajectoires Hamiltoniennes classiques:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}q(t) = \frac{\partial}{\partial p}\mathcal{H}(q, p) \\ \frac{d}{dt}p(t) = -\frac{\partial}{\partial q}\mathcal{H}(q, p) \end{cases} \quad (14)$$

avec $\mathcal{H}(q, p) = \langle q, p | \hat{H} | q, p \rangle$. La trajectoire obtenue $[q(t), p(t)]$ parmi les états cohérents est une approximation de la trajectoire exacte $[\Psi(t)]$, et l'angle α mesure l'erreur causée par cette approximation qui ne tient pas compte de la déformation. On trouve $\alpha \sim \hbar^{1/2} |\partial_{q,p}^2 \mathcal{H}|$, où $|\partial_{q,p}^2 \mathcal{H}|$ est une expression dépendant des dérivées secondes de \mathcal{H} , c'est-à-dire de la dispersion locale des trajectoires classiques. On remarque que cet angle tend vers 0 pour $\hbar \rightarrow 0$, ce qui valide l'approximation classique dans cette limite.

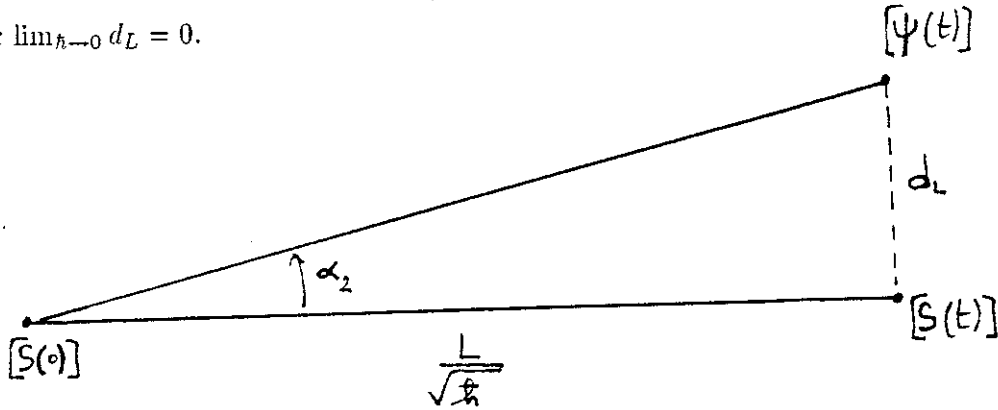
Il est possible de tenir compte de l'étalement du paquet d'onde en considérant une famille élargie d'états cohérents qui sont les "squeezed states", [S] [10, 2]. Leur distribution de Husimi est une gaussienne elliptique et pour les caractériser, il faut quatre paramètres: (q, p) pour le centre, et deux paramètres pour l'amplitude et la direction de la déformation elliptique.

On obtient de même l'évolution classique de ces paramètres en projetant la trajectoire quantique

sur cette famille. On trouve alors que l'angle d'erreur est : $\alpha_2 \sim \hbar |\partial_{q,p}^3 \mathcal{H}|$ ce qui permet de gagner un ordre de grandeur dans la précision, et aussi d'obtenir une approximation arbitrairement bonne de l'état $[\Psi(t)]$ par $[S(t)]$, pour $\hbar \rightarrow 0$. En effet, la conséquence de l'écart angulaire α_2 est que la distance $d(t)$ entre l'état exact $[\Psi(t)]$ et l'état cohérent "squeezé" approché $[S(t)]$ augmente avec le temps. Sur une longueur classique L donnée, (par exemple un tour sur une trajectoire périodique), la longueur quantique est $l = \frac{L}{\sqrt{\hbar}}$ et la distance finale est, pour $\hbar \rightarrow 0$, de l'ordre de :

$$d_L \approx \frac{L}{\sqrt{\hbar}} \tan(\alpha_2) \approx \sqrt{\hbar} L |\partial_{q,p}^3 \mathcal{H}| \quad (15)$$

donc $\lim_{\hbar \rightarrow 0} d_L = 0$.



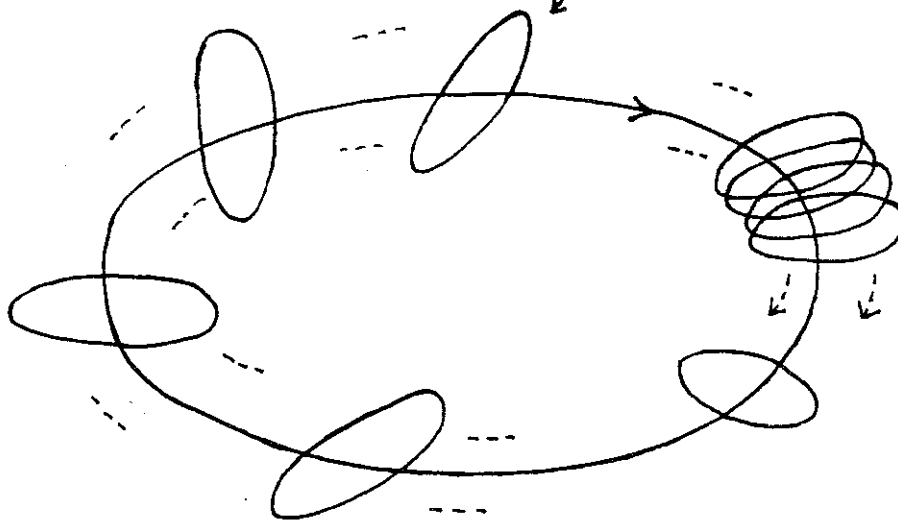
Il est curieux de remarquer que l'évolution de la distribution initiale avec les équations de Liouville classiques donnent une distribution elliptique d'axes principaux parallèles, mais dont le paramètre de déformation est le carré de celui de la distribution de Husimi. Cela est un effet direct de la non-orthogonalité des états cohérents, importante à cette échelle.

IV) Application à la quantification d'une trajectoire périodique stable

La description ci-dessus peut se généraliser pour un système à plusieurs degrés de liberté. Considérons une trajectoire classique périodique, stable, d'énergie E . On peut alors placer un état cohérent "squeezé" $[S(0)]$ particulier sur cette trajectoire, qui redeviendra identique à lui-même au bout d'une période: $[S(T)] = [S(0)]$.

Si l'on considère maintenant la somme de ces états sur une période:

$$|E\rangle = \int_0^T |\widetilde{S}(t)\rangle dt \quad [S(T)] = [S(0)] \quad (16)$$



(le vecteur $|\widetilde{S}(t)\rangle \propto |S(t)\rangle$ est obtenu par transport parallèle de l'état $|S(0)\rangle$ [11]). Le vecteur $|E\rangle$ obtenu est stationnaire d'énergie E à condition qu'il y ait raccordement: $|\widetilde{S}(T)\rangle = |\widetilde{S}(0)\rangle$. Cette dernière condition, qui a une signification géométrique en terme de phase de Berry et d'holonomie, sélectionne certaines trajectoires seulement et ainsi un ensemble discret d'énergies possibles. Intuitivement, on peut comprendre que l'état $|E\rangle$ est stationnaire car sous l'évolution, les termes de la somme restent globalement invariants.

Si la trajectoire avait été instable, l'état cohérent se serait étalé au bout d'une période, et il aurait été impossible de satisfaire la condition de raccordement. Cette différence fait qu'il n'est pas possible aussi simplement d'associer un état stationnaire à une trajectoire instable unique, l'étalement de la distribution mettant en jeu des trajectoires instables voisines, qui à leur tour étaleront la distribution ... Cela permet de deviner pourquoi, dans les cas chaotique où les trajectoires sont toutes instables, la structure des fonctions d'ondes est due à la participation collective de plusieurs trajectoires périodiques, comme le montre la formule de Guztwiller. En conclusion, on a vu de quelle manière les états cohérents sont particulièrement appropriés à l'étude de la limite semi-classique.

Il faut noter qu'il est parfois possible d'associer une limite classique à un problème quantique, à l'aide d'états cohérents généralisés et ainsi permettre une étude du problème à l'aide de méthodes semi-classiques. C'est ce qui se fait par exemple dans le modèle de Lipkin à N particules (fermions identiques) pour la limite $N \rightarrow \infty$ [12]. L'espace de base est dans ce cas la sphère S^2 .

References

- [1] M. Gutzwiller *Chaos in classical and quantum mechanics* (Springer-Verlag) (1990).
- [2] W. M. Zhang, D. H. Feng and R. Gilmore, *Rev. of Modern Phys.* **62**, 867 (1990).
- [3] J.R. Klauder and B.S. Skagerstam *Coherent states, Applications in physics and mathematical physics*, World Scientific (1984).
- [4] J. Anandan and Y. Aharonov, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1697 (1990).
- [5] V. Arnold *Les méthodes mathématiques de la mécanique classique* Ed. Mir. Moscou (1976).
- [6] C. Cohen Tanoudji et al. , *Mécanique quantique*.
- [7] P. Lebœuf *J. Phys. A: Math. Gen.* **24**, 4575 (1991).
- [8] P. Lebœuf and A. Voros *J. Phys. A: Math. Gen.* **23**, 1765 (1990).
- [9] K. Takahashi, *J. of the Phys. Soc. of Japan* **55**, 762 (1986).
- [10] R.G. Littlejohn, *Phys. Rep.* **138**, 193 (1986).
- [11] M. Nakahara, *Geometry, topology and physics*, graduate students series in physics, Adam Hilger, Bristol and N.Y.
- [12] D. Bhaumik, A. Choudhury, M. De and B.D. Roy, *J. Math. Phys.* **22**, 508 (1981).

