

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES

COMME EXIGENCE PARTIELLE
DE LA MAÎTRISE EN PHYSIQUE

PAR
BENJAMIN DUPUIS

TRAJECTOIRES BOHMIENNES DE DIFFÉRENTS SYSTÈMES QUANTIQUES

JANVIER 2017

Université du Québec à Trois-Rivières

Service de la bibliothèque

Avertissement

L'auteur de ce mémoire ou de cette thèse a autorisé l'Université du Québec à Trois-Rivières à diffuser, à des fins non lucratives, une copie de son mémoire ou de sa thèse.

Cette diffusion n'entraîne pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits de propriété intellectuelle, incluant le droit d'auteur, sur ce mémoire ou cette thèse. Notamment, la reproduction ou la publication de la totalité ou d'une partie importante de ce mémoire ou de cette thèse requiert son autorisation.

Résumé

La mécanique bohmiene réintroduit le concept de trajectoire aux objets microscopiques. En effet, la mécanique quantique, théorie expliquant les phénomènes à cette échelle, n'admet qu'une probabilité de présence aux particules. Celles-ci n'ont donc pas de position ni de vitesse bien définies avant d'être mesurées. Le physicien David Bohm a réussi à reproduire les prédictions de cette théorie, tout en redonnant aux particules des trajectoires, que l'on nomme *trajectoires bohmiennes*. Ce faisant, les phénomènes à l'échelle de l'infiniment petit deviennent beaucoup plus intuitifs. Par exemple, l'expérience de Young, où les électrons produisent un patron d'interférence après avoir traversé deux fentes, est expliquée clairement par la mécanique bohmiene. En effet, les électrons traversent chacun une fente (et non deux à la fois comme le mentionnent certaines interprétations de la mécanique quantique) et interagissent avec un *champ quantique*, qui lui est partout et qui contraint les particules à suivre des trajectoires qui finiront par produire le patron d'interférence observé.

Ainsi, les trajectoires bohmiennes correspondent à l'interaction entre le champ quantique et les particules. Ces trajectoires peuvent être calculées pour différentes situations physiques.

Nous les avons déterminées pour différents systèmes quantiques. Nous avons d'abord considéré le cas de l'oscillateur harmonique tronqué par une fente linéaire. Le calcul est fait pour deux méthodes très différentes, soit par une série de polynômes d'Hermite

et par le propagateur. De même, les trajectoires bohmiennes sont calculées pour le potentiel coulombien, c'est-à-dire pour le potentiel de l'hydrogène. Le calcul est fait via une série de polynômes de Laguerre, et les résultats sont comparés entre eux selon différents ordres de calcul utilisés.

Finalement, les trajectoires sont calculées pour un oscillateur quartique, c'est-à-dire l'oscillateur harmonique ayant une perturbation d'ordre 4. La comparaison entre la probabilité quantique et la densité des trajectoires bohmiennes a été étudiée. Des applications physiques possibles d'une théorie quantique hors d'équilibre sont également exposées.

Remerciements

Je voudrais remercier mes parents et amis qui m'ont aidé à persévérer dans mes études tout au long de mon parcours. Je voudrais remercier particulièrement ma grand-mère qui m'a donné énormément de support et d'écoute, surtout dans les moments plus difficiles.

J'aimerais aussi remercier Louis Marchildon, mon directeur de recherche, qui a toujours su être disponible pour m'aider et m'outiller tout au long de mon projet de maîtrise.

Finalement, je voudrais remercier le CRSNG pour l'octroi d'une bourse d'études. Cette aide financière a été cruciale lors de mon parcours universitaire.

Table des matières

Résumé	ii
Remerciements	iv
Table des matières	v
Table des figures	vii
Liste des tableaux	ix
1 Introduction	1
2 Mécanique bohmiennne	6
2.1 Interprétation de Bohm	6
2.2 Différence entre la mécanique bohmiennne et la théorie de l'onde pilote .	11
2.2.1 Théorie de l'onde pilote	11
2.2.2 Mécanique bohmiennne	13
2.3 Calcul des trajectoires	16
2.3.1 L'expérience de Young	16
2.3.2 L'effet Aharonov-Bohm	19
2.3.3 L'effet tunnel	20
2.3.4 Distribution initiale instable	21
3 Trajectoires bohmiennes de l'oscillateur harmonique	23
3.1 Série de polynômes d'Hermite	24
3.2 Propagateur	36

4	Trajectoires bohmiennes pour un potentiel coulombien	41
5	Trajectoires bohmiennes de l'oscillateur quartique	48
5.1	Oscillateur quartique	48
5.2	Calcul de trajectoires	57
5.3	Densité de probabilité	63
6	Perspectives d'une théorie quantique hors d'équilibre	70
6.1	Temps de relaxation pour un système qui n'est pas à l'équilibre	70
6.2	Théorie quantique hors d'équilibre : Applications possibles	73
7	Conclusion	77
	Bibliographie	79

Table des figures

2.1	Résultats d'une expérience de Young à deux fentes, réalisée par Akira Tonomura [16]. On remarque que le patron d'interférence se forme petit à petit. Le nombre d'électrons est a) 11, b) 200, c) 6000, d) 40000, e) 140000.	17
2.2	Trajectoires bohmiennes de l'expérience de Young à deux fentes.	18
2.3	Trajectoires bohmiennes de l'effet Aharonov-Bohm.	20
2.4	Trajectoires bohmiennes de l'effet tunnel. Les lignes horizontales représentent les frontières de la barrière de potentiel.	21
3.1	Représentation de la fonction $\psi_{in}(\xi)$	25
3.1	Comparaison entre la valeur exacte et le développement en série de la fonction ψ_{in} . En rouge : la valeur exacte. En noir : le développement en série.	28
3.2	Trajectoires bohmiennes de l'oscillateur harmonique calculées avec la série de polynômes d'Hermite.	35
3.3	Trajectoires bohmiennes de l'oscillateur harmonique calculées avec le propagateur.	39
4.1	Graphique de la fonction $f(s)$	44
4.2	Trajectoires bohmiennes (s en fonction de τ) associées au potentiel coulombien.	46
5.1	Trajectoires bohmiennes de l'oscillateur quartique pour différentes valeurs de position initiale.	60

5.2	Comparaison entre les trajectoires bohmiennes de l'oscillateur quartique avec correction de l'énergie au premier et deuxième ordre, pour différents λ	62
5.3	Comparaison entre la densité des trajectoires bohmiennes et la probabilité quantique en fonction des valeurs finales des trajectoires, pour $\lambda = 0$. En noir, la probabilité quantique. En vert, la densité des trajectoires bohmiennes.	66
5.4	Comparaison entre la densité des trajectoires bohmiennes et la probabilité quantique, pour $\lambda = 0.005$. En noir, la probabilité quantique. En vert, la densité des trajectoires bohmiennes.	68

Liste des tableaux

3.1	Algorithme montrant comment calculer les trajectoires bohmiennes pour l'oscillateur harmonique tronqué avec la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4.	33
3.2	Erreur relative sur la périodicité des trajectoires pour différents ordres de calcul, avec $\Delta t = 0.001$	40
4.1	Erreur relative sur les trajectoires pour différents incréments de temps Δt	47
5.1	Erreur relative entre la densité des trajectoires bohmiennes et la probabilité quantique, avec $\Delta t = 0.005$	68

Chapitre 1

Introduction

La mécanique quantique est une des théories physiques dont les prédictions sont le plus en accord avec les résultats expérimentaux. Elle nous a dévoilé un tout nouveau monde, totalement différent de notre expérience quotidienne, et a plus tard mené à la révolution technologique que nous vivons aujourd'hui. Toutefois, cette théorie pose problème lorsque l'on tente d'interpréter son formalisme.

Dès les débuts de la mécanique quantique, soit en 1925–26, des problèmes liés à son interprétation surgirent. D'abord, on tenta d'expliquer son formalisme via l'interprétation de Copenhague [1, 2]. Celle-ci fut développée par quelques physiciens, en particulier par le danois Niels Bohr. L'interprétation de Copenhague comporte quelques éléments spécifiques. D'abord, les objets quantiques se caractérisent par une dualité onde-particule. Quoique totalement non intuitive par rapport à notre expérience quotidienne, ce n'est pas cette notion qui fut la plus difficile à accepter. Le problème réside plutôt dans le caractère intrinsèquement probabiliste de la mécanique quantique. Avant de l'avoir mesurée, une particule ne possède pas, par exemple, de position, mais est en superposition d'états, ces états décrivant les probabilités pour cette particule "d'acquérir" une position quelconque une fois mesurée.

Des critiques sont rapidement survenues, entre autres du physicien autrichien Erwin Schrödinger, celui dont l'équation éponyme est la pièce centrale en mécanique quantique. Il élaborait une expérience de pensée dans laquelle un chat serait placé dans une boîte munie d'un dispositif radioactif ayant 50 % de chances de se déclencher [3]. Selon l'interprétation de Copenhague, le chat serait alors dans une superposition d'états, à la fois mort et vivant, et "deviendrait" mort ou vivant une fois la boîte ouverte.

Une autre critique célèbre de l'interprétation de Copenhague est venue du trio de physiciens formé d'Albert Einstein, Boris Podolsky, et Nathan Rosen, dans un article paru en 1935 [4]. Dans cet article, ils font mention d'une expérience de pensée, nommée aujourd'hui *paradoxe EPR*. Ils considèrent d'abord la notion de réalité d'une quantité physique, c'est-à-dire que cette quantité peut être prédite avec certitude sans perturber le système étudié. Or, pour deux particules corrélées, la connaissance d'une quantité se rapportant à la première particule nous permet de prédire une quantité se rapportant à la deuxième avec certitude, et ce sans l'avoir mesurée. Le problème est qu'il n'y a aucun élément de réalité en mécanique quantique standard nous permettant d'obtenir une telle certitude, la fonction d'onde étant toujours de nature probabiliste. Ainsi, le trio EPR arrive à la conclusion que la mécanique quantique est incomplète. À la toute fin de leur article, ils mentionnent qu'ils pensent possible de pouvoir ajouter des éléments à la théorie quantique pour la compléter. Un tel type de théorie est aujourd'hui appelée *théorie à variables cachées*.

Dans un article paru en 1964, le physicien nord-irlandais John Stewart Bell obtint un résultat crucial concernant ces théories à variables cachées [5]. En supposant une telle théorie de type déterministe et locale, il trouva ce qu'on appelle *les inégalités de Bell*. Or, l'expérience montre que ces inégalités sont systématiquement violées. Ainsi, nous voilà forcés d'abandonner au moins une de ces deux caractéristiques, c'est-à-dire la localité et/ou le déterminisme. Ce dernier énonce qu'on peut prédire avec certitude les quantités physiques d'une particule, sans les avoir mesurées; l'abandonner nous

ferait revenir à l'interprétation de Copenhague. La localité stipule qu'aucune influence effectuée plus rapidement que la lumière n'est possible ; la relativité restreinte semblait avoir clos ce point depuis longtemps. Délaisser cette option ne paraît donc pas plus envisageable. Mais, les expériences réalisées par Alain Aspect et ses collaborateurs [6, 7, 8] entre 1980 et 1982 ont montré sans équivoque l'intrication quantique, c'est-à-dire le phénomène où deux particules séparées d'une distance arbitraire sont corrélées, et agissent comme un seul système. Les deux particules semblent ainsi s'affecter, et ce plus rapidement que la vitesse de la lumière. L'appel à la non-localité, même étant totalement contradictoire avec notre intuition, est ainsi devenu inévitable. Une citation de John Stewart Bell [9] résume bien cette réalité :

L'idée même d'action à distance est très répugnante pour les physiciens. Si j'avais une heure pour le faire, je vous bombarderais de citations de Newton, d'Einstein, de Bohr et de tous les autres grands hommes, vous disant combien il est impensable que, en faisant quelque chose ici, nous pouvons changer une situation lointaine. Je pense que les pères fondateurs de la mécanique quantique n'avaient pas tellement besoin des arguments d'Einstein sur la nécessité qu'il n'y ait pas d'action à distance, parce qu'ils regardaient ailleurs. L'idée qu'il y ait soit déterminisme, soit action à distance, leur était si répugnante qu'ils détournèrent le regard. Eh bien, c'est la tradition, et nous devons apprendre, dans la vie, parfois, à apprendre de nouvelles traditions. Et il se pourrait bien que nous devions apprendre non pas tant à accepter l'action à distance, mais à accepter l'insuffisance de "pas d'action à distance". [traduction libre]

Ainsi, selon le théorème de Bell, une théorie à variables cachées déterministe se doit d'être non locale. Est-ce possible ? Le physicien américain David Bohm a proposé, en 1952, une telle théorie [10]. Celle-ci est expliquée dans la section 2.1. La proposition de

Bohm, qu'on appelle *mécanique bohmienne*, reproduit les prédictions statistiques de la mécanique quantique, tout en étant déterministe. En effet, elle ramène le concept de corpuscules et de trajectoires, de façon analogue à la mécanique classique. Toutefois, il est important de mentionner que, même si la mécanique bohmienne est déterministe, on ne peut faire mieux que des prédictions statistiques en raison de la méconnaissance de la position initiale des particules.

L'aspect non local de la mécanique bohmienne réside dans un nouveau potentiel, nommé *potentiel quantique*, qui s'ajoute au potentiel classique. C'est par ce potentiel, ou plus précisément par un champ quantique engendré par celui-ci, qu'il peut y avoir influence plus rapide que la vitesse de la lumière. Ainsi, la mécanique bohmienne est déterministe et non locale, tout en concordant avec les prédictions statistiques de la mécanique quantique standard. La raison pour cela est simple : l'expression mathématique pour calculer la distribution de probabilité est la même dans les deux cas. Toutefois, la signification de la fonction d'onde est fort différente. Selon l'interprétation de Copenhague, celle-ci représente complètement l'état du système, et n'est pas un champ réel. On peut toutefois, en principe, déterminer la fonction d'onde d'un ensemble de systèmes semblablement préparés [11]. En mécanique bohmienne, la fonction d'onde décrit l'évolution du champ quantique, et les particules sont décrites de façon corpusculaire.

Les trajectoires bohmiennes correspondent à l'interaction entre le champ quantique et les particules. Ces trajectoires peuvent être calculées pour différentes situations physiques. Dans le chapitre 2, les équations se rapportant à la mécanique bohmienne sont démontrées. De plus, la différence entre la mécanique bohmienne, et une autre interprétation déterministe de la mécanique bohmienne, nommée théorie de l'onde pilote, est expliquée. Finalement, une brève revue littéraire des trajectoires bohmiennes calculées pour diverses situations physiques est présentée.

Les calculs que nous avons réalisés se trouvent dans les chapitres 3, 4 et 5. Dans

le chapitre 3, les trajectoires bohmiennes sont déterminées pour le cas de l'oscillateur harmonique tronqué par une fente linéaire. Le calcul est fait pour deux méthodes très différentes, soit par une série de polynômes d'Hermite et par le propagateur; ces deux façons donnant les mêmes résultats. Le temps de calcul est très inférieur pour la deuxième méthode, rendant celle-ci nettement plus avantageuse.

Dans le chapitre 4, les trajectoires bohmiennes sont calculées pour le potentiel coulombien, c'est-à-dire pour le potentiel de l'hydrogène. Le calcul est fait via une série de polynômes de Laguerre, et les résultats sont comparés entre eux selon différents ordres de calcul utilisés.

Dans le chapitre 5, les trajectoires sont calculées pour un oscillateur quartique, c'est-à-dire l'oscillateur harmonique ayant une perturbation d'ordre 4. Comme on le sait, la distribution de probabilités est la même en mécanique bohmienne que celle donnée par l'interprétation de Copenhague. De plus, la distribution de probabilités est reproduite par les trajectoires bohmiennes si on suppose que les particules sont initialement distribuées selon le carré de la fonction d'onde. Dans la section 5.3, la comparaison entre la densité des trajectoires bohmiennes et la probabilité quantique a été étudiée.

Dans le chapitre 6, des applications physiques possibles d'une théorie quantique hors d'équilibre sont présentées.

Chapitre 2

Mécanique bohmienne

2.1 Interprétation de Bohm

Le physicien américain David Bohm a proposé, en 1952, une interprétation déterministe de la mécanique quantique [10]. En mécanique bohmienne, les particules ont une position et une vitesse bien définies, donc ont des trajectoires, qu'on nomme *trajectoires bohmiennes*. Ainsi, cette interprétation est en mesure de reproduire les prédictions statistiques de la mécanique quantique standard, sans avoir recours à des probabilités objectives.

La mécanique bohmienne est une théorie à variables cachées, c'est-à-dire que certains éléments sont ajoutés à la mécanique quantique standard afin de la compléter. Ici, la position et la vitesse (ou quantité de mouvement), étant bien définies en tout temps, font office de "variables cachées". En effet, ces deux paramètres ne peuvent être définis en même temps en mécanique quantique standard.

D'après le théorème de Bell, une théorie à variables cachées doit être non locale

afin de reproduire les résultats statistiques de la mécanique quantique. En mécanique bohmiennne, la non-localité est produite via le *potentiel quantique*. Ce dernier serait présent partout, et influencerait les particules de façon instantanée.

Finalement, il est important de mentionner que, pour pouvoir prédire le résultat d'une mesure d'un système, il faudrait connaître parfaitement les conditions initiales de celui-ci. Or, il est impossible de le faire sans modifier son état. Ainsi, même si la mécanique bohmiennne est une interprétation déterministe de la mécanique quantique, les prédictions statistiques sont inévitables.

On peut obtenir les équations de la mécanique bohmiennne en posant que

$$\psi(\vec{r}, t) = R(\vec{r}, t) \exp(iS(\vec{r}, t)/\hbar), \quad (2.1)$$

où $R(\vec{r}, t)$ et $S(\vec{r}, t)$ sont des fonctions réelles.

L'équation de Schrödinger est

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r})\psi. \quad (2.2)$$

En insérant l'équation (2.1) dans cette dernière, on obtient

$$\begin{aligned}
i\hbar \exp(iS(\vec{r}, t)/\hbar) \left\{ \frac{\partial R}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} R \frac{\partial S}{\partial t} \right\} \\
= -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot \left[\exp(iS(\vec{r}, t)/\hbar) \left\{ \vec{\nabla} R + \frac{i}{\hbar} R \vec{\nabla} S \right\} \right] \\
+ V(\vec{r}) R \exp(iS(\vec{r}, t)/\hbar). \tag{2.3}
\end{aligned}$$

En simplifiant les exponentielles et en développant le gradient du côté droit de la dernière équation, on a

$$\begin{aligned}
i\hbar \left\{ \frac{\partial R}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} R \frac{\partial S}{\partial t} \right\} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \nabla^2 R + 2\frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} R \cdot \vec{\nabla} S \right. \\
\left. + \frac{i}{\hbar} R \nabla^2 S - \frac{1}{\hbar^2} R (\vec{\nabla} S)^2 \right\} + V(\vec{r}) R. \tag{2.4}
\end{aligned}$$

L'équation (2.4) comprend une partie réelle et une partie imaginaire. Pour qu'elle soit vraie, ces deux parties doivent séparément obéir à l'équation. Ainsi, on obtient deux équations, une pour la partie réelle, et l'autre pour la partie imaginaire. Ces deux équations sont respectivement

$$m \frac{\partial R}{\partial t} = -\vec{\nabla} R \cdot \vec{\nabla} S - \frac{1}{2} R \nabla^2 S, \tag{2.5}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} - \frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} - V(\vec{r}). \tag{2.6}$$

Posons

$$Q \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R}. \tag{2.7}$$

On remarque que Q a des unités d'énergie et que, à cause du signe -, il s'ajoute à V dans l'équation (2.6). On nommera donc Q comme étant le *potentiel quantique*. En faisant la substitution $P = R^2$, les équations (2.5) et (2.6) deviennent respectivement

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(P \frac{\vec{\nabla} S}{m} \right) = 0, \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} - Q - V(\vec{r}). \quad (2.9)$$

On peut généraliser les équations (2.8) et (2.9) pour le cas à n particules. On obtient

$$\frac{\partial P(q, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \vec{\nabla}_i \cdot \left(P(q, t) \frac{\vec{\nabla}_i S(q, t)}{m_i} \right) = 0, \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial S(q, t)}{\partial t} = -\sum_{i=1}^n \frac{(\vec{\nabla}_i S(q, t))^2}{2m_i} - Q(q, t) - V(q, t). \quad (2.11)$$

où, pour n particules, le potentiel quantique devient

$$Q = -\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\nabla_i^2 R}{R} \quad (2.12)$$

avec

$$q(t) = (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n). \quad (2.13)$$

En mécanique bohmiennne, la fonction $P(\mathbf{q}, t)$ est égale au carré absolu de la fonction d'onde, et représente la probabilité de présence d'une particule au point \mathbf{q} au temps t , tout comme en mécanique quantique standard. Ainsi, en posant que

$$\vec{\nabla}_i S(\mathbf{q}, t) = \vec{p}_i, \quad (2.14)$$

où \vec{p}_i est la quantité de mouvement de la particule i , l'équation (2.10) devient l'équation de continuité de la distribution de probabilité P . De plus, en supposant que Q est un potentiel, l'équation (2.11) a la forme d'une équation de mouvement d'Hamilton-Jacobi. Des équations (2.1) et (2.14), la vitesse de la particule i sera donc donnée par

$$\vec{v}_i = \frac{\hbar}{m_i} \operatorname{Im} \left[\frac{\vec{\nabla}_i \psi(\mathbf{q}, t)}{\psi(\mathbf{q}, t)} \right]. \quad (2.15)$$

Il est intéressant de noter que pour $\hbar \rightarrow 0$, c'est-à-dire lorsqu'on tend vers la mécanique classique, le potentiel Q donné par l'équation (2.12) tend vers 0. Ainsi, l'équation (2.11) devient l'équation d'Hamilton-Jacobi de la mécanique classique.

Nous avons posé que Q est un potentiel, et que la quantité de mouvement des particules est donnée par l'équation (2.14). Nous pouvons donc considérer que ces équations décrivent des objets corpusculaires, de façon analogue à la mécanique classique. Ces objets auraient ainsi une position et une vitesse bien définies. Les trajectoires qu'ils suivraient seraient elles aussi tout aussi bien définies.

N'y a-t-il pas là une contradiction avec le principe d'incertitude d'Heisenberg, stipulant qu'on ne peut connaître de façon définie la position et la quantité de mouvement d'une particule ? Pour Bohm, l'incertitude sur ces paramètres vient non pas

d'une caractéristique intrinsèque de la nature, mais bien de l'incapacité de connaître la position initiale d'une particule plus précisément que ce qui est donné par le carré de la fonction d'onde. C'est cette indétermination des conditions initiales qui rend inexorables les prédictions statistiques. Il s'agit, dans la théorie de Bohm, d'une limite fondamentale, que des progrès techniques ne peuvent dépasser.

De plus, dans l'interprétation bohmiennne, le carré absolu de la fonction d'onde est, comme en mécanique quantique standard, associé à la distribution de probabilité des particules. Ainsi, les trajectoires bohmiennes doivent reproduire la densité de probabilité des particules afin que les prédictions statistiques de l'interprétation bohmiennne concordent avec celles faites par la mécanique quantique standard.

2.2 Différence entre la mécanique bohmiennne et la théorie de l'onde pilote

Dans un article écrit en 2014, le physicien Antony Valentini a obtenu un résultat très intéressant par rapport à la mécanique bohmiennne et la théorie de l'onde pilote [12]. D'abord, il montra que celles-ci, même si elles présentent plusieurs analogies, peuvent être différentes, et que la première n'est pas viable physiquement si une supposition n'est pas respectée. Résumons ces deux théories.

2.2.1 Théorie de l'onde pilote

En 1927, le physicien français Louis de Broglie a proposé une théorie, appelée *théorie de l'onde pilote*, dans laquelle les particules seraient guidées par une fonction d'onde [13]. Sa théorie se décrit de la façon suivante.

Soit un ensemble de n particules ayant comme coordonnées $q(t) = (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$. Au temps t , la vitesse associée à la particule i sera, selon l'équation (2.14), donnée par

$$\vec{v}_i = \frac{1}{m_i} \vec{\nabla}_i S, \quad (2.16)$$

où S/\hbar est la phase complexe de la fonction $\psi(q, t)$ solution de l'équation Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi + V \psi, \quad (2.17)$$

avec V comme potentiel classique, et $\psi = |\psi| e^{iS/\hbar}$. Les équations (2.16) et (2.17) sont les équations de base de la théorie de l'onde pilote.

Cette théorie reproduit les résultats de la mécanique quantique standard, pourvu que la distribution initiale soit donnée par le carré de la fonction d'onde. Cette propriété a été démontrée par Bohm [10]. Ainsi, pour une telle distribution initiale, la loi de Born, qui dit que la densité de probabilité ρ est égale à $|\psi|^2$, est valable en tout temps. En effet, pour des particules ayant une vitesse donnée par

$$\dot{q} = \left(\frac{1}{m_1} \vec{\nabla}_1 S, \frac{1}{m_2} \vec{\nabla}_2 S, \dots, \frac{1}{m_n} \vec{\nabla}_n S \right),$$

la densité ρ respectera nécessairement l'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \dot{q}) = 0. \quad (2.18)$$

Ici, $\vec{\nabla}$ fait intervenir des dérivées par rapport à l'ensemble des coordonnées.

Or, de l'équation de Schrödinger, la fonction d'onde ψ respectera la même équation :

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (|\psi|^2 \dot{q}) = 0. \quad (2.19)$$

Ce faisant, il est clair, en comparant les deux dernières équations, que pour une distribution initiale $\rho(q, 0) = |\psi(q, 0)|^2$, on aura $\rho(q, t) = |\psi(q, t)|^2$. Il s'en suit que la théorie de l'onde pilote reproduira nécessairement les résultats de la mécanique quantique standard.

2.2.2 Mécanique bohmiennne

La mécanique bohmiennne, quant à elle, n'est pas écrite en termes de vitesses, comme c'est le cas pour la théorie de l'onde pilote. En effet, la mécanique bohmiennne est plutôt formulée en termes d'une équation d'accélération :

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = -\vec{\nabla}_i (V + Q), \quad (2.20)$$

où Q est le potentiel quantique, donné en termes de ψ par

$$Q = - \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\nabla_i^2 |\psi|}{|\psi|}. \quad (2.21)$$

Pour que les prédictions faites par la mécanique bohmiennne concordent avec celles

de la mécanique quantique standard, Bohm fit deux suppositions :

- i) Les particules sont initialement distribuées selon le carré de la fonction d'onde, c'est-à-dire que

$$\rho(q, 0) = |\psi(q, 0)|^2. \quad (2.22)$$

- ii) Les particules ont une quantité de mouvement initiale donnée par

$$\vec{p}_i(0) = \vec{\nabla}_i S(q, 0). \quad (2.23)$$

Par ces deux conditions, et des équations (2.20) et (2.17), la quantité de mouvement des particules au temps t sera nécessairement

$$\vec{p}_i(t) = \vec{\nabla}_i S(q, t), \quad (2.24)$$

comme nous l'avons décrit plus haut dans la section 2.1. Voyons explicitement comment l'équation du premier ordre implique l'équation de second ordre.

D'abord, introduisons la notation suivante :

$$\partial_{i\alpha} = \frac{\partial}{\partial r_{i,\alpha}}, \quad (2.25)$$

où $r_{i,\alpha}$ est la coordonnée r_α de la particule i .

L'équation (2.11) peut s'écrire comme

$$\frac{\partial S}{\partial t} = - \sum_{j,\beta} \frac{(\partial_{j\beta} S)(\partial_{j\beta} S)}{2m_j} - Q - V. \quad (2.26)$$

Donc, de l'équation de premier ordre (2.24), on a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} p_{i,\alpha} &= \frac{d}{dt} (\partial_{i\alpha} S) = \frac{\partial}{\partial t} (\partial_{i\alpha} S) + \sum_{j,\beta} \partial_{j\beta} (\partial_{i\alpha} S) \frac{d}{dt} r_{j,\beta} \\ &= \partial_{i\alpha} \left(\frac{\partial S}{\partial t} \right) + \sum_{j,\beta} v_{j,\beta} \partial_{j\beta} (\partial_{i\alpha} S) \\ &= \partial_{i\alpha} \left\{ - \sum_{j,\beta} \frac{(\partial_{j\beta} S)(\partial_{j\beta} S)}{2m_j} - Q - V \right\} + \sum_{j,\beta} v_{j,\beta} \partial_{j\beta} (\partial_{i\alpha} S) \\ &= -\partial_{i\alpha} (Q + V) - \sum_{j,\beta} \frac{1}{m_j} (\partial_{j\beta} S) \partial_{i\alpha} (\partial_{j\beta} S) + \sum_{j,\beta} v_{j,\beta} \partial_{j\beta} (\partial_{i\alpha} S) \\ &= -\partial_{i\alpha} (Q + V). \end{aligned}$$

Ainsi,

$$\frac{d}{dt} \vec{p}_i = m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = -\vec{\nabla}_i (V + Q).$$

L'équation (2.24) est la même que l'équation de vitesse de la théorie de l'onde pilote, donnée par (2.16). Conséquemment, les trajectoires obtenues par ces deux théories seront les mêmes.

La différence entre la mécanique bohmiennne et la théorie de l'onde pilote réside dans le point suivant. En mécanique bohmiennne, la condition ii) doit être supposée afin d'obtenir la vitesse des particules donnée par l'équation (2.24). Dans la théorie de

l'onde pilote, l'équation (2.24) est l'équation fondamentale, et la condition ii) est simplement l'application de celle-ci au temps initial. Ainsi, les deux théories deviennent équivalentes seulement lorsque la deuxième supposition est faite.

2.3 Calcul des trajectoires

Plusieurs situations physiques ont déjà été explorées via l'approche de la mécanique bohmiennne, et quelques-unes sont exposées dans un livre écrit par David Bohm lui-même et le physicien britannique Basil Hiley [14], ainsi que dans le livre de Peter Holland [15].

2.3.1 L'expérience de Young

L'expérience des deux fentes de Young est probablement une des plus importantes et une des plus fondamentales dans l'histoire de la physique. Dans celle-ci, on constate que des électrons envoyés à travers deux fentes produisent un patron d'interférence sur un écran placé derrière celles-ci. Ce résultat nous montre d'abord que les électrons ont un comportement ondulatoire, ce qui est différent d'une conception où on voit les électrons comme étant des objets seulement corpusculaires. Mais il y a un résultat encore plus surprenant. Lorsque l'on envoie un seul électron à la fois, le patron d'interférence se produit quand même, comme si l'électron passait à travers les deux fentes en même temps, pour interférer avec lui-même. Le phénomène est montré à la Figure 2.1 [14].

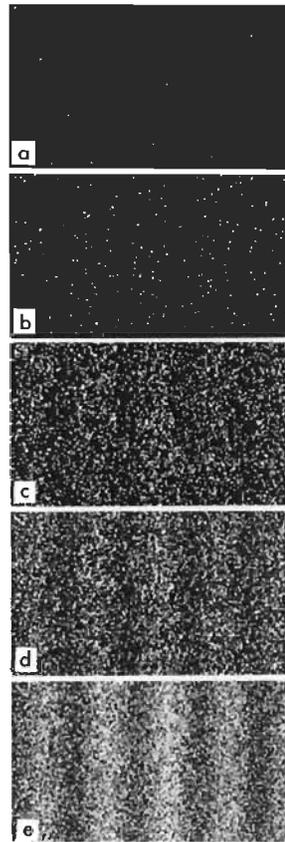


FIGURE 2.1 – Résultats d’une expérience de Young à deux fentes, réalisée par Akira Tonomura [16]. On remarque que le patron d’interférence se forme petit à petit. Le nombre d’électrons est a) 11, b) 200, c) 6000, d) 40000, e) 140000.

Le fait qu’un seul électron puisse agir d’une telle façon peut sembler totalement irréconciliable avec une interprétation déterministe, classique, et corpusculaire de l’électron. Le physicien Richard Feynman lui-même allait en ce sens en parlant de cette expérience [17] :

Nous choisissons d’examiner le phénomène (l’interférence) qu’il est impossible, absolument impossible, d’expliquer de n’importe quelle manière classique (...).

Et pourtant, la mécanique bohmiennne vient faire mentir Feynman. En effet, celle-ci

donne un état corpusculaire et des trajectoires définies aux électrons. C'est l'interaction entre le **champ quantique** (qui lui est partout, donc également entre les deux fentes dans l'expérience de Young) et les électrons qui produit le patron d'interférence observé. En effet, les résultats du calcul fait avec la mécanique bohmiennne reproduisent exactement les résultats expérimentaux [14]. Les particules sont initialement distribuées selon le carré de la fonction d'onde. Les points finaux des trajectoires bohmiennes correspondent aux traces des électrons recueillies sur l'écran, comme montré à la Figure 2.2 [14, p. 33]. Les endroits où s'agglomèrent les trajectoires correspondent à des probabilités plus fortes de détecter un électron. On remarque que ces agglomérations forment un patron d'interférence, et ce dernier est identique à celui obtenu expérimentalement.

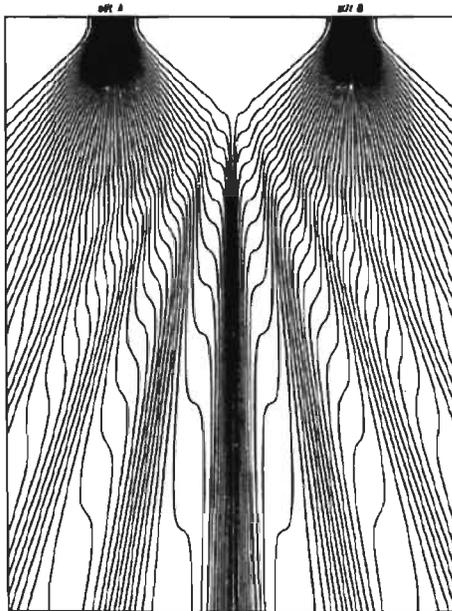


FIGURE 2.2 – Trajectoires bohmiennes de l'expérience de Young à deux fentes.

2.3.2 L'effet Aharonov-Bohm

L'effet Aharonov-Bohm [18] démontre que la figure d'interférence entre deux faisceaux d'électrons peut être modifiée par un champ magnétique, même si celui-ci est en dehors de la trajectoire classique des électrons. L'effet semble *a priori* mystérieux, car si le champ magnétique n'agit pas sur les électrons, comment le patron d'interférence de ceux-ci peut-il être modifié ?

En réalité, cet effet montre l'influence du vecteur potentiel \vec{A} , dérivé de l'équation $\vec{B} = (\vec{\nabla} \times \vec{A})$. L'expérience est la suivante. Un faisceau d'électrons traverse un séparateur. Les deux faisceaux résultant contournent des lignes de flux et se recombinent sur un écran. Lorsque le flux est nul, un patron d'interférence est observé sur l'écran, mais pour une valeur non nulle, le patron se modifie. La prédiction faite par la mécanique quantique a été confirmée expérimentalement [19]. Les trajectoires bohmiennes de l'effet Aharonov-Bohm sont montrées à la figure 2.3 [14, p. 53]. Le calcul a été fait pour le cas où le faisceau d'électrons est scindé par deux fentes. Le flux magnétique est entre celles-ci.

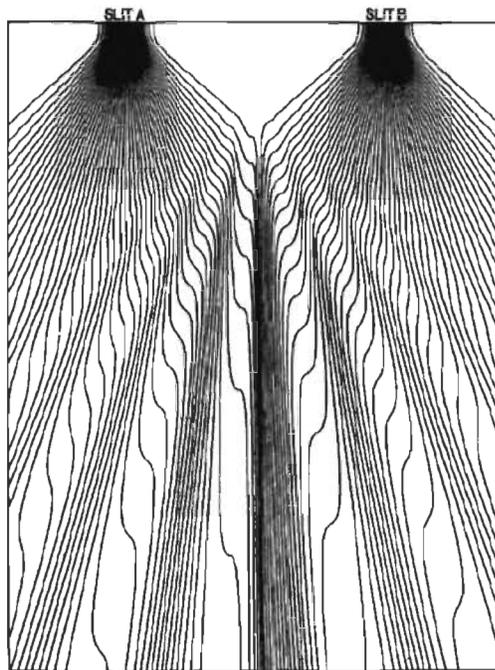


FIGURE 2.3 – Trajectoires bohmiennes de l'effet Aharonov-Bohm.

2.3.3 L'effet tunnel

L'effet tunnel est un phénomène qui met vraiment en évidence la différence nette entre la mécanique classique et la mécanique quantique. Cet effet montre que des électrons peuvent traverser une barrière de potentiel, même si leur énergie est inférieure à l'énergie minimale requise pour franchir cette barrière. Les trajectoires bohmiennes de l'effet tunnel ont été calculées pour un paquet d'onde avec une énergie $E = V/2$, où V est la barrière de potentiel [20]. Elles sont illustrées à la figure 2.4 [14, p. 77], où l'axe horizontal va de 0 à 16 et l'axe vertical de 0.40 à 0.85. On peut voir sur le graphique que la plupart des trajectoires bifurquent, et que ce sont celles au devant du paquet qui peuvent franchir la barrière de potentiel. Au final seulement quelques-unes vont effectivement franchir celle-ci. Les détails dépendent de la forme du paquet d'onde.

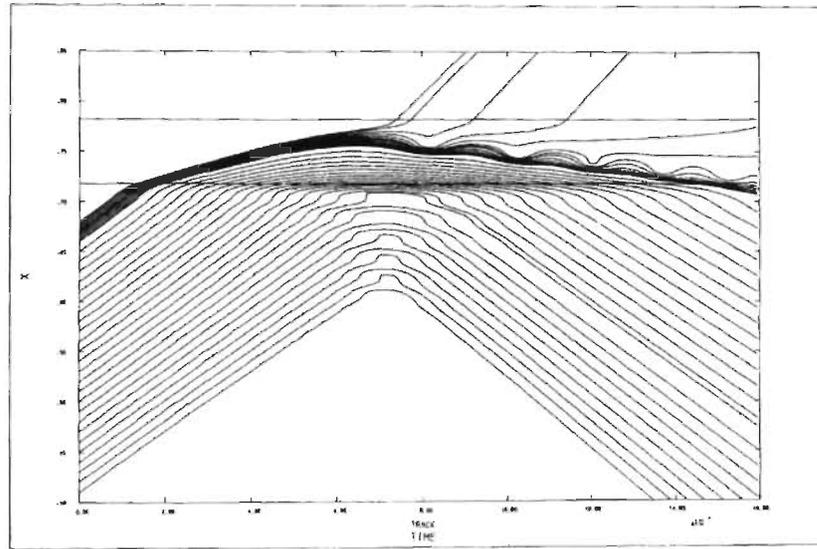


FIGURE 2.4 – Trajectoires bohmiennes de l’effet tunnel. Les lignes horizontales représentent les frontières de la barrière de potentiel.

2.3.4 Distribution initiale instable

Comme nous l’avons décrit plus haut dans la section 2.2, la mécanique bohmiennne et la théorie de l’onde pilote sont deux théories identiques lorsque la supposition $\vec{p}_i(0) = \vec{\nabla}_i S(q, 0)$ est faite.

Qu’arrive-t-il lorsqu’on abandonne celle-ci, car en principe, rien ne l’interdit en mécanique bohmiennne ?

Dans un article de Colin et Valentini [21], on répond à cette question de façon nette : on ne peut abandonner cette condition initiale car les trajectoires bohmiennes deviennent instables. En effet, Colin et Valentini ont calculé numériquement des trajectoires pour lesquelles il y avait une légère perturbation par rapport à la condition initiale $\vec{p}_i(0) = \vec{\nabla}_i S(q, 0)$. Ils ont obtenu que celles-ci ne tendent pas vers la probabilité quantique donnée par la loi de Born, c’est-à-dire que $\rho = |\psi|^2$, ce qui est évidemment

en contradiction avec les observations expérimentales où cette loi est toujours respectée. Ainsi, en abandonnant la condition $\vec{p}_i(0) = \vec{\nabla}_i S(q, 0)$, ce qui est théoriquement permis en mécanique bohmiennne, il n'y aurait aucune raison de s'attendre à une physique quantique à l'équilibre.

La conclusion est donc que la supposition $\vec{p}_i(0) = \vec{\nabla}_i S(q, 0)$ est nécessaire. Comme mentionné, celle-ci peut, en principe, être abandonnée en mécanique bohmiennne, mais elle est inévitable en théorie de l'onde pilote, puisqu'elle correspond simplement à l'équation de vitesse appliquée au temps initial. Conséquemment, cette condition étant obligatoire, il s'en suit que les deux théories correspondent finalement à la même. Dans ce mémoire, nous allons parler de trajectoires bohmiennes, en faisant toujours l'hypothèse que cette condition est respectée.

Chapitre 3

Trajectoires bohmiennes de l'oscillateur harmonique

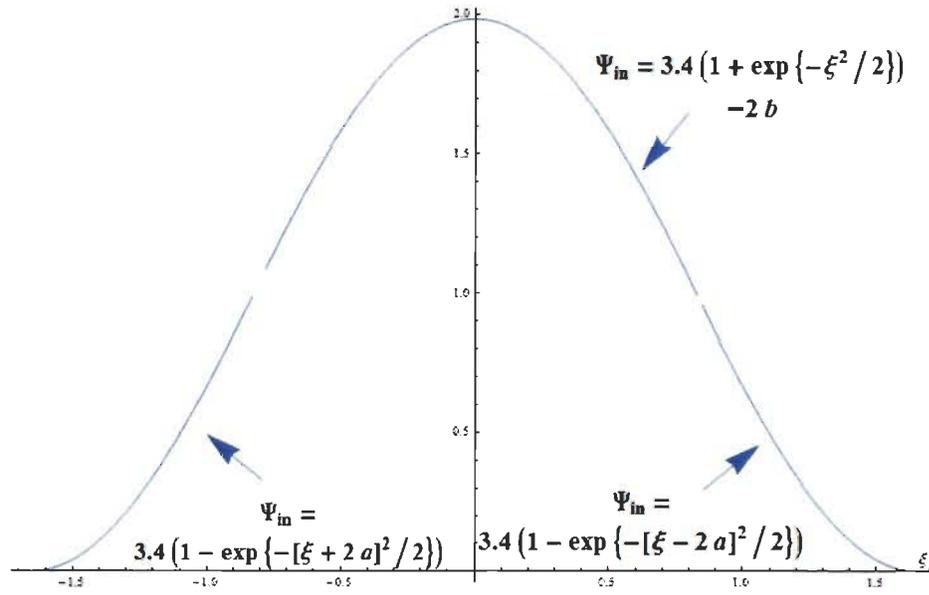
L'oscillateur harmonique étant un problème ayant de nombreuses applications en physique, il est donc intéressant de l'étudier ici et de calculer les trajectoires bohmiennes y étant associées. Nous allons l'appliquer au cas d'une fente linéaire. Celui-ci est donc un cas simplifié de l'expérience de Young à deux fentes. Ainsi, le problème correspond à un oscillateur tronqué par une fente linéaire. Nous allons calculer les trajectoires bohmiennes résultantes de deux façons différentes : avec une série de polynômes d'Hermite, et avec le propagateur de l'oscillateur harmonique. Comme nous allons le voir, ces deux méthodes donnent les mêmes résultats, mais celle du propagateur est avantageuse en raison de son temps de calcul nettement inférieur.

3.1 Série de polynômes d'Hermite

Nous considérons, dans ce chapitre, un système régi par l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique. En mécanique quantique, la fonction d'onde initiale d'un système peut être choisie de façon essentiellement arbitraire. Nous choisirons une fonction d'onde initiale ψ_{in} continue avec une dérivée continue, telle que donnée à l'équation (3.1). Cette fonction fait intervenir un grand nombre de fonctions propres de l'oscillateur harmonique et, en ce sens, elle présente un bon niveau de généralité.

$$\psi_{in}(\xi) = \begin{cases} 3.4(1 - \exp(-\frac{1}{2} (\xi + 2a)^2)) & \text{si } -2a < \xi < -a \\ 3.4(1 + \exp(-\xi^2/2)) - 2b & \text{si } -a < \xi < a \\ 3.4(1 - \exp(-\frac{1}{2} (\xi - 2a)^2)) & \text{si } a < \xi < 2a \end{cases} . \quad (3.1)$$

Ici $a = 0.830404268$, $b = 2.408465463$. La fonction est nulle ailleurs, afin de correspondre à une fente linéaire de largeur $4a$ (de $-2a$ à $+2a$). Ainsi, on se concentre uniquement sur le comportement de la fonction d'onde à l'intérieur de la fente. Nous avons choisi cette fonction, car elle a le comportement d'une gaussienne, et les constantes a et b sont telles que la fonction et sa dérivée sont essentiellement continues à $\xi = a$ et $\xi = 2a$ (ainsi qu'à $\xi = -a$ et $\xi = -2a$), c'est-à-dire qu'elles sont continues jusqu'à une grande précision. La fonction est représentée à la Figure 3.1. À noter que cette fonction correspond à la valeur initiale de la fonction d'onde de chaque particule, et non pas à la distribution initiale de celles-ci. En effet, comme nous verront plus loin, les particules sont initialement distribuées selon une fonction gaussienne.


 FIGURE 3.1 – Représentation de la fonction $\psi_{in}(\xi)$

On veut développer la fonction $\psi_{in}(\xi)$ via une série de polynôme d'Hermite :

$$\psi_{in}(\xi) = \sum_n c_n \exp\left\{-\frac{1}{2}\xi^2\right\} H_n(\xi), \quad (3.2)$$

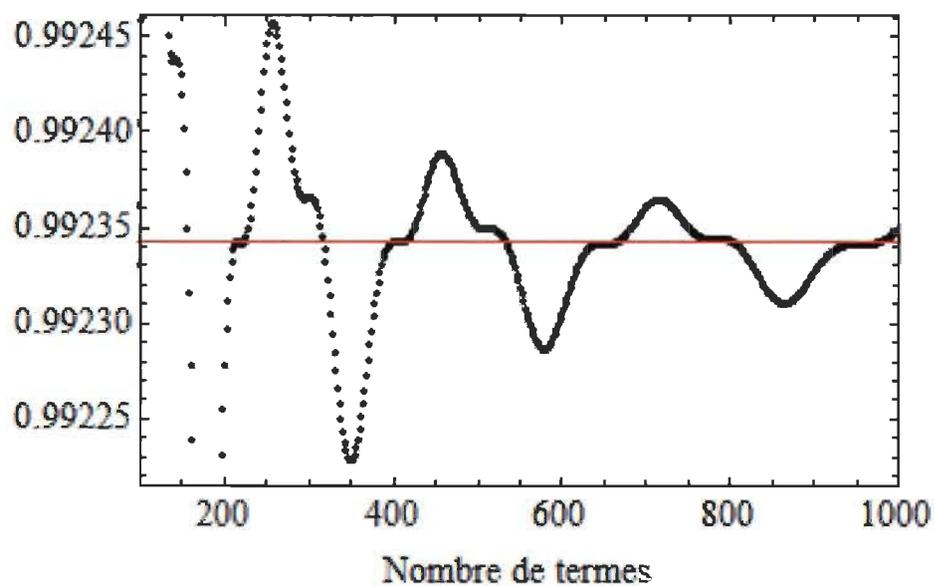
Il faut maintenant déterminer la valeur des coefficients c_n . De l'équation (3.2), on obtient, en utilisant les propriétés d'orthogonalité des polynômes d'Hermite [22],

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi_{in}(\xi) e^{-\xi^2/2} H_m(\xi) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \left[\sum_n c_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \right] e^{-\xi^2/2} H_m(\xi) \\ &= \sum_n c_n \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) \\ &= \sum_n c_n \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm} = \sqrt{\pi} 2^m m! c_m. \end{aligned}$$

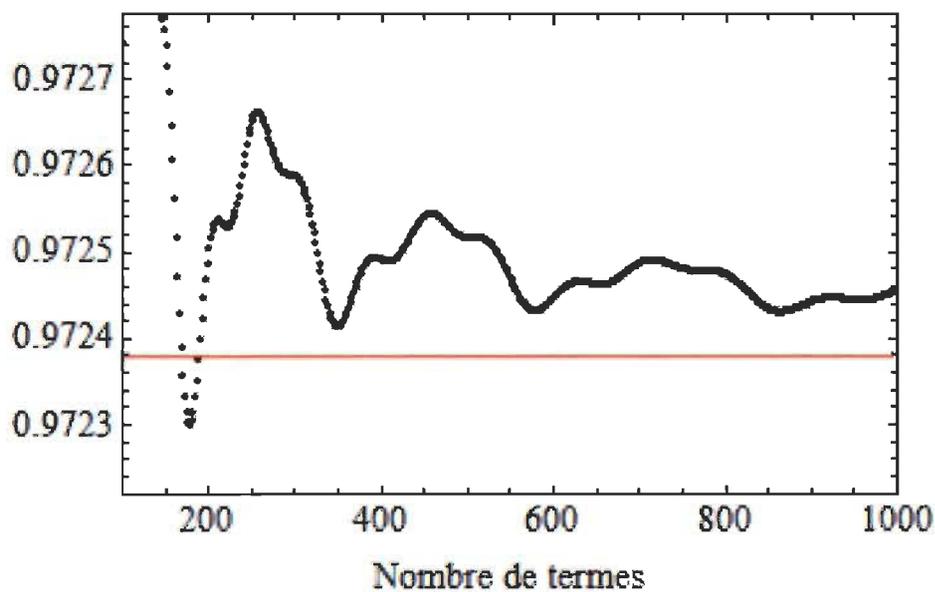
Ainsi, en prenant la fonction ψ_{in} donnée par l'équation (3.1) on obtient que

$$\begin{aligned}
c_n &= \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{in}(\xi) e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) d\xi \\
&= \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \left[\int_{-2a}^{-a} 3.4 \left(1 - \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\xi + 2a)^2 \right\} \right) e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) d\xi \right. \\
&\quad + \int_{-a}^{+a} [3.4(1 + \exp(-\xi^2/2)) - 2b] e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) d\xi \\
&\quad \left. + \int_a^{2a} 3.4 \left(1 - \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\xi - 2a)^2 \right\} \right) e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) d\xi \right]. \quad (3.3)
\end{aligned}$$

Il nous reste à déterminer le nombre de termes nécessaires à la série de polynômes d'Hermite afin de reproduire le comportement de la fonction exacte. La comparaison entre la fonction ψ_{in} exacte et sa représentation en série de polynômes est montrée à la Figure 3.1. Comme nous pouvons le voir, l'utilisation de 1000 termes donne une excellente approximation, peu importe à quel point la fonction et la série sont évaluées. Ce nombre de termes est élevé, ce qui nous indique que la série de polynômes d'Hermite est lente à converger, comparativement à d'autres formes de séries. Les graphiques a) et b) représentent la fonction exacte et la série de polynômes évalués à deux valeurs, soit avant et après la coupure à $a = 0.830404268$ respectivement, alors que les graphiques c) et d) montrent une évaluation avant et après la coupure à $2a = 1.660808536$.



a) $\xi = 0.83$



b) $\xi = 0.84$

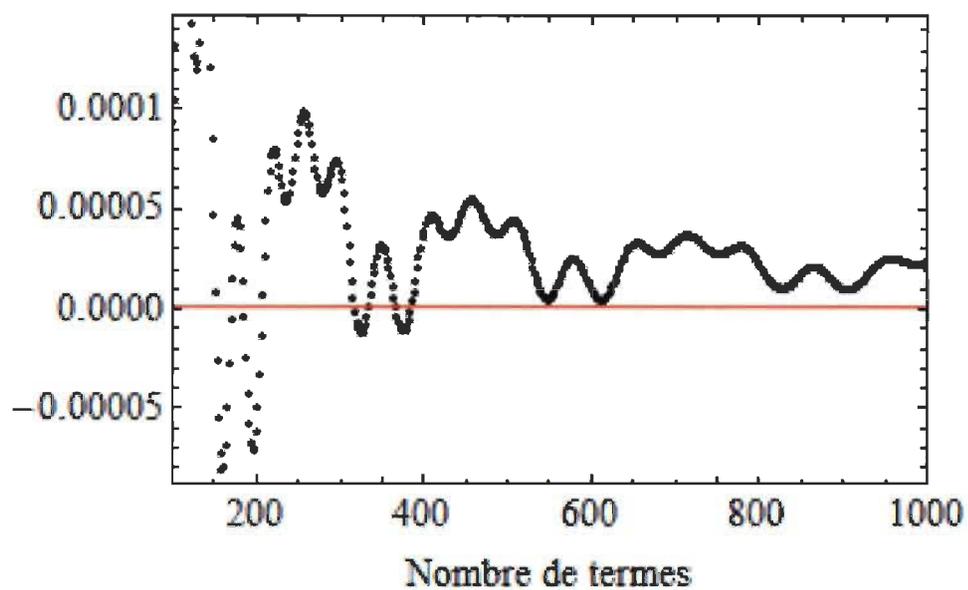
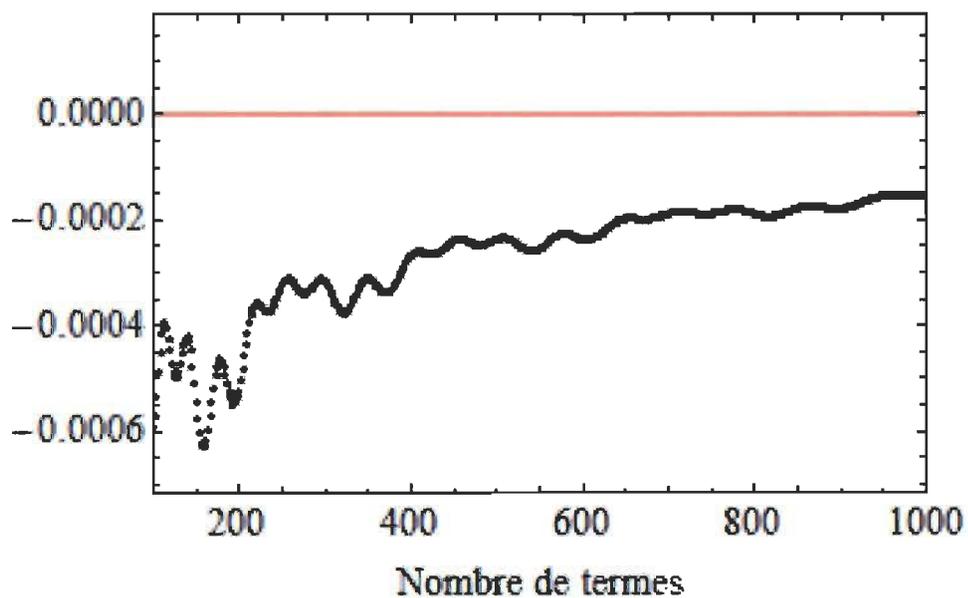
c) $\xi = 1.66$ d) $\xi = 1.67$

FIGURE 3.1 – Comparaison entre la valeur exacte et le développement en série de la fonction ψ_{in} . En rouge : la valeur exacte. En noir : le développement en série.

Considérons un système qui se déplace librement selon l'axe des x et qui oscille harmoniquement selon l'axe y . La troncation de la fonction initiale est une façon de modéliser un oscillateur qui passe dans une fente. L'Hamiltonien est donné par

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2. \quad (3.4)$$

La solution de l'équation de Schrödinger pour ce potentiel correspondant à la fonction initiale

$$\psi(x, y, t = 0) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}mvx\right\} \psi_{in}(\xi)$$

est donnée par

$$\begin{aligned} \psi(x, y, t) = & \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[mvx - \frac{mv^2}{2}t\right]\right\} \\ & \times \sum_n c_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) e^{-i\omega_n t}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

où $\omega_n = \frac{1}{\hbar}E_n = \omega(n + 1/2)$ et où $\xi = (m\omega/\hbar)^{1/2}y$. Selon l'axe y , le système se développe comme un oscillateur initialement confiné à l'intervalle $[-2a, 2a]$. Rappelons que la généralité de la fonction d'onde initiale correspond au fait qu'elle fait intervenir plusieurs fonctions propres de l'oscillateur harmonique. La fonction initiale n'est pas normalisée, mais le facteur de normalisation n'intervient pas dans le calcul des trajectoires bohmiennes.

La vitesse associée aux trajectoires bohmiennes est donnée par l'équation (2.15), appliquée ici à une particule :

$$\vec{v} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \frac{\vec{\nabla} \psi}{\psi} \right\}. \quad (3.6)$$

Ainsi, de l'équation (3.5), on obtient que

$$v_x = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right\} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \frac{i}{\hbar} m v \right\} = v. \quad (3.7)$$

La constante arbitraire v introduite ci-dessus représente donc la composante suivant x de la vitesse de la particule. De plus,

$$\begin{aligned} v_y &= \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right\} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right\} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} \right\} \\ &= \left(\frac{\hbar\omega}{m} \right)^{1/2} \operatorname{Im} \left\{ \frac{\sum_n c_n e^{-i\omega n t} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \right]}{\sum_n c_n e^{-i\omega n t} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)} \right\}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Or, on sait que [22]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \right] &= \left[-\xi H_n(\xi) + \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} \right] e^{-\xi^2/2} \\ &= \left[n H_{n-1}(\xi) - \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) \right] e^{-\xi^2/2}. \end{aligned}$$

Ce faisant, l'équation (3.8) devient

$$v_y = \left(\frac{\hbar\omega}{m}\right)^{1/2} \operatorname{Im} \left\{ \frac{\sum_n c_n e^{-i\omega n t} \left[n H_{n-1}(\xi) - \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) \right] e^{-\xi^2/2}}{\sum_n c_n e^{-i\omega n t} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}} \right\}. \quad (3.9)$$

En prenant les variables sans dimension suivantes :

$$\tau = \omega t \quad , \quad \zeta = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x, \quad (3.10)$$

on obtient

$$v_\xi = \frac{d\xi}{d\tau} = \frac{d\xi}{dy} \frac{dy}{d\tau} = \frac{d\xi}{dy} \frac{dy}{dt} \frac{dt}{d\tau} = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} v_y \left(\frac{1}{\omega}\right) = \left(\frac{m}{\omega\hbar}\right)^{1/2} v_y. \quad (3.11)$$

$$v_\zeta = \frac{d\zeta}{d\tau} = \frac{d\zeta}{dx} \frac{dx}{d\tau} = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} v_x \left(\frac{1}{\omega}\right) = \left(\frac{m}{\hbar\omega}\right)^{1/2} v. \quad (3.12)$$

De l'équation (3.9), la valeur de $v_\xi(\xi, \tau)$ est donc

$$\begin{aligned} v_\xi(\xi, \tau) &= \operatorname{Im} \left\{ \frac{\sum_n c_n e^{-i\tau(n+1/2)} \left[n H_{n-1}(\xi) - \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) \right] e^{-\xi^2/2}}{\sum_n c_n e^{-i\tau(n+1/2)} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}} \right\} \\ &\equiv \operatorname{Im} \{ f(\xi, \tau) \}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

la dernière égalité définissant la fonction $f(\xi, \tau)$.

Les trajectoires bohmiennes ont été calculées avec la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 spécifiée par les équations (3.14) à (3.18) .

$$k_1 = v_\xi(\xi, \tau) \quad , \quad (3.14)$$

$$k_2 = v_\xi(\xi + 0.5 * \Delta * k_1, \tau + 0.5 * \Delta) \quad , \quad (3.15)$$

$$k_3 = v_\xi(\xi + 0.5 * \Delta * k_2, \tau + 0.5 * \Delta) \quad , \quad (3.16)$$

$$k_4 = v_\xi(\xi + \Delta * k_3, \tau + \Delta) \quad , \quad (3.17)$$

$$\xi(\tau + \Delta\tau) = \xi(\tau) + (\Delta/6)(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad , \quad (3.18)$$

$$\zeta(\tau + \Delta\tau) = \zeta(\tau) + v_\zeta \Delta\tau. \quad (3.19)$$

L'algorithme montrant comment calculer les trajectoires bohmiennes avec la méthode Runge-Kutta d'ordre 4 est présenté au tableau 3.1.

TABLEAU 3.1 – Algorithme montrant comment calculer les trajectoires bohmiennes pour l'oscillateur harmonique tronqué avec la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4.

Début du programme

Définir une **fonction** $f(\xi, \tau)$.

Retourner la valeur de $f(\xi, \tau)$ selon l'équation (3.13) .

Fin de la **fonction**.

Initialiser la valeur de ζ , de τ et de $\Delta\tau$. Poser v_ζ et un temps final T . Initialiser une liste L .

Boucler sur i pour générer des points initiaux $\xi(i)$ distribués selon une gaussienne d'écart-type σ .

Boucler de $l = 0$ jusqu'à $l = T$ par incrément de 1.

Évaluer $v_\xi(\xi, \tau)$ en prenant la partie imaginaire de $f(\xi, \tau)$.

Calculer $\zeta(\tau + \Delta\tau)$ selon l'équation (3.19), et calculer k_1, k_2, k_3, k_4 et $\xi(\tau + \Delta\tau)$ selon les équations (3.14) à (3.18).

Incrémenter τ à $\tau + \Delta\tau$.

Ajouter le duo de points (ζ, ξ) à la liste L .

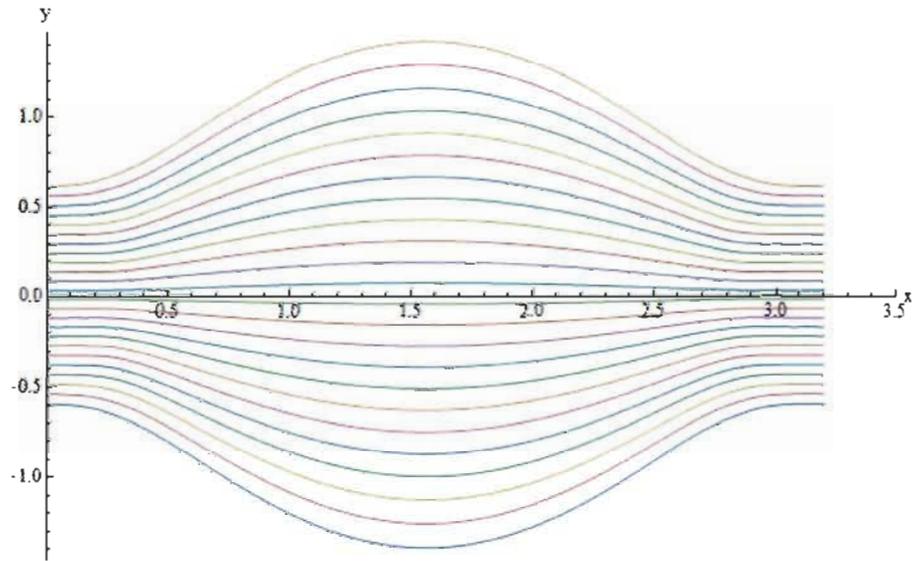
Fin de la **boucle**.

Fin de la **boucle**.

Faire un graphique avec les points de la liste L .

Fin du programme

Les trajectoires bohmiennes calculées avec la série de polynômes d'Hermite sont illustrées à la figure 3.2 a). Les points sont initialement distribués sur l'axe vertical selon une gaussienne avec un écart-type σ , de $-2a$ à $2a$. Cette distribution reproduit donc l'effet d'une fente linéaire. Nous avons fait le calcul pour 25 trajectoires, avec un incrément en temps de 0.005. L'axe horizontal correspond à l'axe des x , c'est-à-dire l'axe selon lequel le système se déplace librement. L'axe vertical, (axe des y), représente l'axe où le système oscille harmoniquement. Dans la figure 3.2 b), la densité de probabilité $\psi\psi^*$ a été calculée au temps $t = 0$ avec la formule (3.5). Les axes sont les mêmes que dans la figure a). Les régions claires représentent des régions où la densité de probabilité est forte, et les régions sombres des endroits où la densité est faible. Ainsi, il est intéressant de constater la ressemblance entre les trajectoires bohmiennes et le calcul de la probabilité quantique de la mécanique quantique standard.

(a) $\sigma = 0.45$

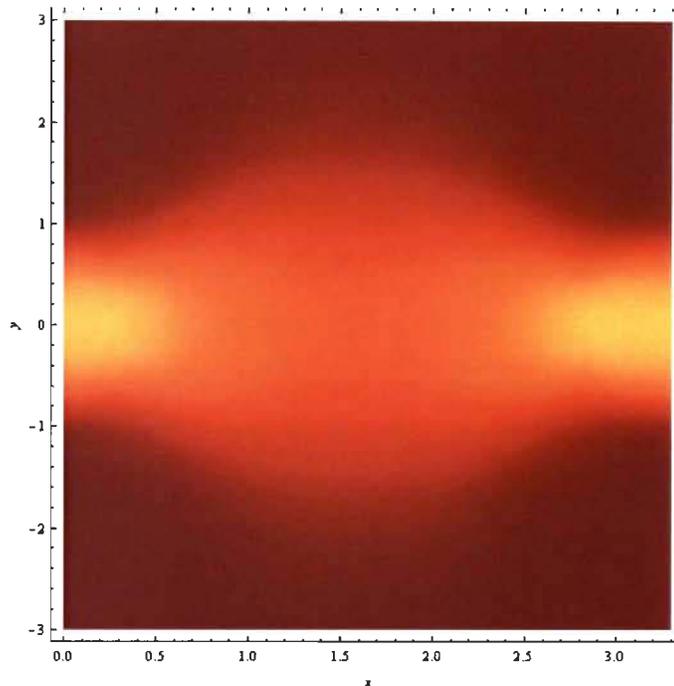
(b) Densité de probabilité $\psi\psi^*$

FIGURE 3.2 – Trajectoires bohmiennes de l'oscillateur harmonique calculées avec la série de polynômes d'Hermite.

Quelques remarques sont à faire par rapport à ces graphiques. D'abord, les points initiaux semblent équidistants, mais sont bel et bien distribués initialement selon une fonction gaussienne. De plus, les trajectoires ont été choisies avec des points initiaux entre -0.6 et 0.6 comme on peut le voir sur le graphique, car les trajectoires au-delà de cet intervalle nécessitent des précisions trop grandes (donc des temps de calculs trop longs) pour donner des résultats acceptables. Finalement, on peut voir que les trajectoires sont périodiques sur π , ce qui était anticipé étant donné le caractère périodique de la fonction d'onde (3.5) de l'oscillateur harmonique.

3.2 Propagateur

Une autre façon de calculer la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger est de le faire via le *propagateur* [23]. La relation entre la fonction d'onde ψ et le propagateur U est

$$\psi(y, t) = \int_{-\infty}^{\infty} U(y, t; y_0, t_0) \psi(y_0, t_0) dy_0. \quad (3.20)$$

Or, nous connaissons de façon exacte la valeur du propagateur de l'oscillateur harmonique. En effet, à $t_0 = 0$, celui-ci est donné par

$$U_{osc.} = \left\{ \frac{\omega m}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)} \right\}^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{2 \sin(\omega t)} [(\xi^2 + \xi_0^2) \cos(\omega t) - 2\xi\xi_0] \right\}, \quad (3.21)$$

où $\xi = (m\omega/\hbar)^{1/2} y$. Conséquemment, l'équation (3.20) devient

$$\begin{aligned} \psi(y, t) &= \left\{ \frac{\omega m}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)} \right\}^{1/2} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i}{2 \sin(\omega t)} [(\xi^2 + \xi_0^2) \cos(\omega t) - 2\xi\xi_0] \right\} \psi_{in}(\xi_0) d\xi_0, \end{aligned}$$

où la fonction ψ_{in} est donnée à l'équation (3.1).

Le gradient de la fonction d'onde $\psi(y, t)$ associée à chacune des trajectoires de l'oscillateur harmonique a été calculé par différence finie. Sa valeur est

$$\frac{\partial \psi(y, t)}{\partial y} = \frac{-\psi(y + 2\Delta, t) + 8\psi(y + \Delta, t) - 8\psi(y - \Delta, t) + \psi(y - 2\Delta, t)}{12\Delta} + O(\Delta^4). \quad (3.22)$$

Encore une fois, nous faisons les changements de variables sans dimension données par l'équation (3.10). Posons la fonction ϕ suivante

$$\phi(\xi, \tau) = \left(\frac{1}{2\pi i \sin(\tau)} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i}{2 \sin(\tau)} [(\xi^2 + \xi_0^2) \cos(\tau) - 2\xi\xi_0] \right\} \psi_{in}(\xi_0) d\xi_0. \quad (3.23)$$

Ce faisant, la vitesse reliée aux trajectoires bohmiennes telle que calculée avec le propagateur est

$$v_\xi = \text{Im} \left(\frac{1}{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right), \quad (3.24)$$

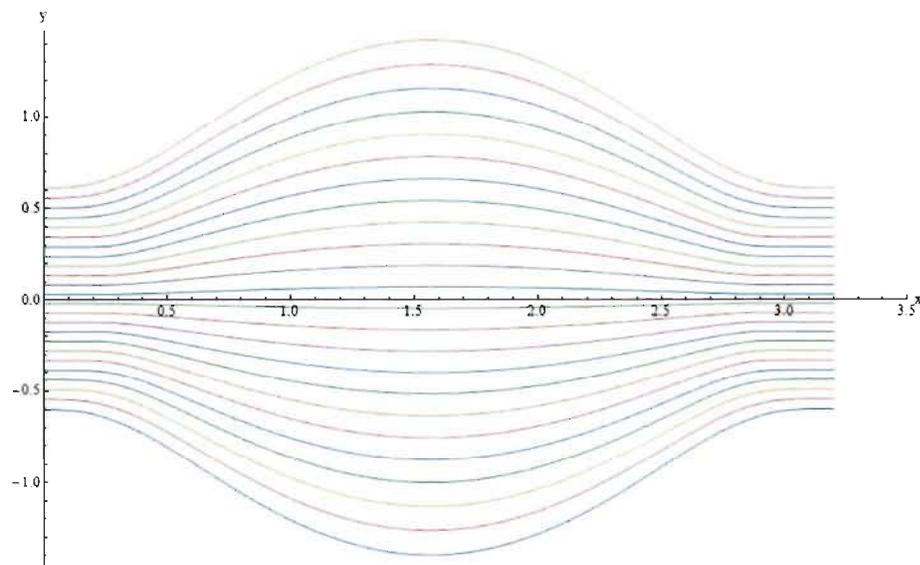
où la dérivée de la fonction ϕ est obtenue par l'équation (3.22).

Les trajectoires bohmiennes calculées avec le propagateur sont illustrées à la figure 3.3 a), où les points sont initialement distribués selon une gaussienne avec un écart-type σ . On remarque la forte ressemblance avec la figure 3.2. Encore une fois, l'axe horizontal (axe des x) correspond à l'axe selon lequel le système se déplace librement et l'axe vertical (axe des y), représente l'axe où le système oscille harmoniquement. Dans la figure 3.3 b), la densité de probabilité $\psi\psi^*$ a été calculée au temps $t = 0$.

L'erreur relative entre les trajectoires des deux méthodes a été calculée. Le calcul de l'erreur est le suivant

$$\text{erreur} = \frac{\sum_i |y_{i,\text{propagateur}} - y_{i,\text{hermite}}|}{\sum_i |y_{i,\text{hermite}}|}, \quad (3.25)$$

où $y_{i,\text{propagateur}}$ correspond à la valeur finale de la trajectoire i calculée avec la méthode du propagateur, et $y_{i,\text{hermite}}$ correspond à la valeur finale de la trajectoire i calculée avec la méthode de la série d'Hermite. Dans notre cas, erreur = 0.0002. Ainsi, l'erreur entre les deux méthodes est très faible, rendant la méthode du propagateur très avantageuse, en raison de son temps de calcul nettement moindre.



(a) $\sigma = 0.45$

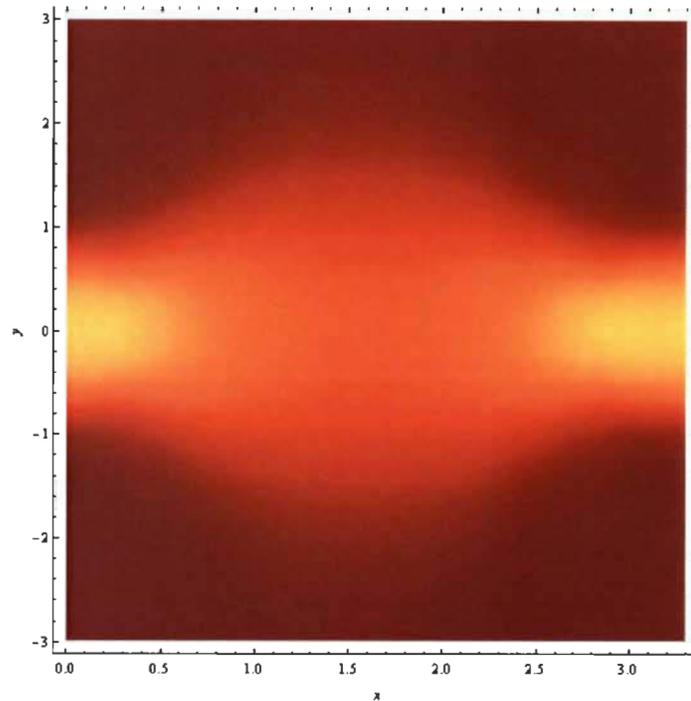
(b) Densité de probabilité $\psi\psi^*$

FIGURE 3.3 – Trajectoires bohmiennes de l'oscillateur harmonique calculées avec le propagateur.

Les trajectoires bohmiennes associées à l'oscillateur harmonique ont nécessairement une période de π , car la fonction d'onde le décrivant est périodique sur π . L'erreur relative entre les points à $\tau = 0$ et $\tau = \pi$ a été calculée pour 20 trajectoires¹. Le calcul a été fait à trois ordres différents, soit le premier ordre², la méthode Runge-Kutta d'ordre 2, et la méthode Runge-Kutta d'ordre 4. Les résultats ont été mis dans le tableau 3.2.

1. Pour le propagateur, les points ont été pris à $\tau = \pi/2$ et $\tau = 3\pi/2$, car il y a discontinuité à 0 et à π .

2. Le premier ordre correspond au calcul direct de la dérivée, c'est-à-dire un calcul du type $y(t + \Delta t) = y(t) + v\Delta t$.

TABLEAU 3.2 – Erreur relative sur la périodicité des trajectoires pour différents ordres de calcul, avec $\Delta t = 0.001$.

Ordre de calcul	Série	Propagateur
Premier ordre	0.0038	0.0048
Deuxième ordre	0.0016	0.0018
Quatrième ordre	0.0018	0.0014

L'erreur très similaire entre les deux méthodes de calcul rend le propagateur très intéressant. Ce dernier nécessite un temps de calcul nettement inférieur à la méthode en série de polynômes. En effet, avec le propagateur, la fonction d'onde est calculée avec un seul terme, donné par l'équation (3.23). Avec la série de polynômes d'Hermite, 1000 termes sont nécessaires pour calculer cette même fonction d'onde, obtenue par l'équation (3.5), en plus des coefficients c_n à calculer *a priori*, donnés par l'équation (3.3).

Évidemment, l'intégrale de l'équation (3.23) est plus longue à calculer pour l'ordinateur que chaque terme de l'équation (3.5), mais la méthode du propagateur est tout de même environ **6 fois plus rapide**. En effet, avec la série de polynômes, le temps de calcul a été d'environ 12 heures, alors qu'avec le propagateur le temps de calcul a été de seulement 2 heures. Le seul défaut de cette dernière méthode est la discontinuité périodique lorsque τ est égal à un nombre entier de π .

Chapitre 4

Trajectoires bohmiennes pour un potentiel coulombien

Le potentiel coulombien est le potentiel utilisé pour représenter l'interaction entre le noyau et l'électron d'un atome d'hydrogène. Ce potentiel varie selon $V(r) \sim -1/r$. Le problème étudié ici est donc celui du potentiel central, c'est-à-dire que la fonction d'onde peut dépendre uniquement de la distance r et non de son orientation. Calculons ici les trajectoires bohmiennes y étant associées.

Soit $\psi_{nlm}(\vec{r}) = u_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ les fonctions propres normalisées de l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène. Choisissons une fonction d'onde initiale $f(r)$ qui, pour des raisons de simplicité, ne dépend ni de θ ni de ϕ . Les valeurs de l et m seront donc égales à 0. On peut développer $f(r)$ en termes des fonctions $u_{nl}(r)$, avec $n > 0$. Pour l'hydrogène $V(r) = -Ze^2/r$, avec $Z = 1$.

Les fonctions $\psi_{nlm}(\vec{r})$ sont orthonormées. On a donc

$$\begin{aligned}\delta_{nm} &= \int d\vec{r} \psi_{n00}^*(\vec{r}) \psi_{m00}(\vec{r}) = \int dr d\Omega r^2 u_{n0}(r) Y_{00}(\theta, \phi) u_{m0}(r) Y_{00}(\theta, \phi) \\ &= \int_0^\infty dr r^2 u_{n0}(r) u_{m0}(r).\end{aligned}$$

Soit les changements de variables suivant :

$$s = r/a_0 \quad ; \quad \bar{u}_{n0}(s) = a_0^{3/2} u_{n0}(s). \quad (4.1)$$

Ainsi,

$$\delta_{nm} = \int_0^\infty ds s^2 \bar{u}_{n0}(s) \bar{u}_{m0}(s). \quad (4.2)$$

La fonction d'onde initiale est donc représentée par

$$f(s) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{u}_{n0}(s). \quad (4.3)$$

Pour des raisons de simplicité, nous choisirons tous les coefficients c_n non nuls égaux à 1. Les coefficients c_n s'expriment comme une intégrale de la fonction f :

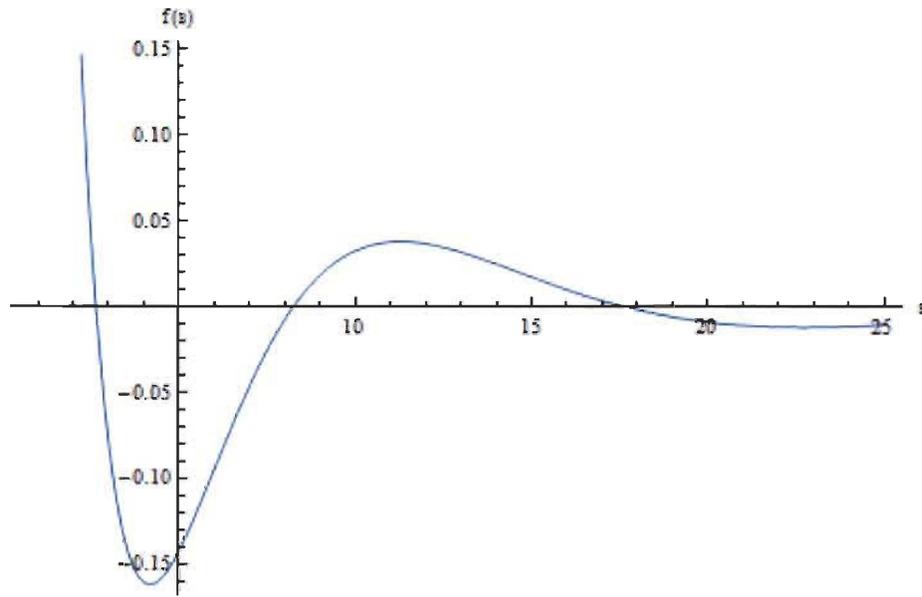
$$\begin{aligned}
\int_0^\infty ds s^2 f(s) \bar{u}_{m0}(s) &= \int_0^\infty ds s^2 \left[\sum_{n=1}^\infty c_n \bar{u}_{n0}(s) \right] \bar{u}_{m0}(s) \\
&= \sum_{n=1}^\infty c_n \int_0^\infty ds s^2 \bar{u}_{n0}(s) \bar{u}_{m0}(s) \\
&= \sum_{n=1}^\infty c_n \delta_{nm} \\
&= c_m.
\end{aligned}$$

En insérant l'expression explicite des fonctions $\bar{u}_{n0}(s)$ dans l'équation (4.3), on obtient [23]

$$c_m = \int_0^\infty ds s^2 f(s) \left\{ \left(\frac{2}{m} \right)^3 \frac{1}{2m^2} \right\}^{1/2} e^{-s/m} L_{m-1}^1(2s/m), \quad (4.4)$$

$$f(s) = \sum_{n=1}^\infty c_n \left\{ \left(\frac{2}{n} \right)^3 \frac{1}{2n^2} \right\}^{1/2} e^{-s/n} L_{n-1}^1(2s/n). \quad (4.5)$$

Le graphique de la fonction $f(s)$ est montré à la figure 4.1. La fonction a été calculée avec 5 termes dans la sommation de l'équation (4.5), avec les coefficients tous égaux à 1.

FIGURE 4.1 – Graphique de la fonction $f(s)$

La fonction d'onde au temps t est donnée par la solution générale de l'équation de Schrödinger :

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{u}_{n0}(s) e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{u}_{n0}(s) \exp\left\{\frac{it|E_1|}{\hbar n^2}\right\}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

où nous avons utilisé le fait que pour le potentiel en $1/r$, $E_n = -\frac{1}{n^2}|E_1|$. Nous avons choisi d'utiliser 5 termes dans la sommation de l'équation précédente lors du calcul de la fonction d'onde.

Définissons

$$\tau = \frac{2t|E_1|}{\hbar} = \frac{tme^4}{\hbar^3} = \frac{te^2}{\hbar a_0}, \quad (4.7)$$

où m , e et a_0 sont les constantes atomiques usuelles.

On sait que la vitesse associée aux trajectoires bohmiennes est

$$\vec{v} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \frac{\vec{\nabla} \psi}{\psi} \right\}. \quad (4.8)$$

Ainsi, la vitesse radiale v_r sera

$$v_r = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right\}. \quad (4.9)$$

Finalement, en utilisant les changements de variables donnés aux équations (4.1) et (4.7), on obtient

$$\begin{aligned} v_s &= \frac{ds}{d\tau} = \frac{ds}{dr} \frac{dr}{dt} \frac{dt}{d\tau} = \frac{1}{a_0} v_r \frac{\hbar a_0}{e^2} = \frac{\hbar}{e^2} v_r \\ &= \frac{\hbar}{e^2} \left[\frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right\} \right] = \frac{\hbar^2}{e^2 m} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial r} \right\} = \frac{\hbar^2}{e^2 m} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial s} \frac{1}{a_0} \right\} \\ &= \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial s} \right\}, \end{aligned}$$

$$\text{car } a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m}.$$

Les trajectoires bohmiennes obtenues sont illustrées à la figure 4.2 a). Elles ont été calculées avec la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4, avec une distribution gaussienne des points initiaux de $y = 0$ à $y = 1$.

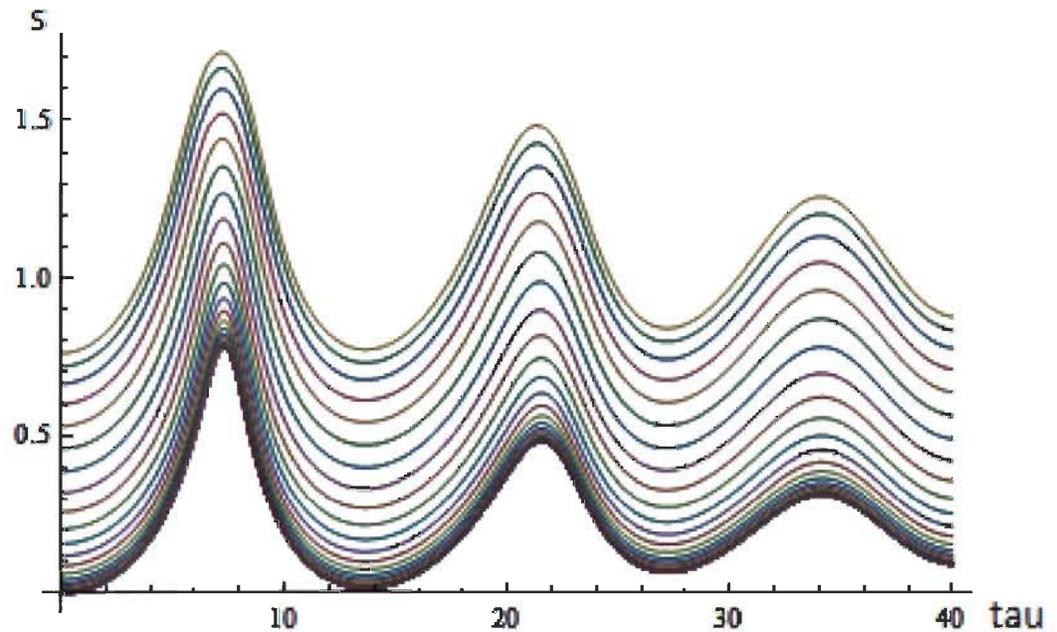


FIGURE 4.2 – Trajectoires bohmiennes (s en fonction de τ) associées au potentiel coulombien.

Les trajectoires de la figure 4.2 ont été calculées pour un incrément Δt de 0.0001. Le tableau 4.1 montre l'erreur relative entre les points finaux des trajectoires pour différents incréments de temps, comparées aux valeurs de référence avec $\Delta t = 0.0001$. Comme on le remarque, l'incrément de temps $\Delta t = 0.001$ est avantageux, car il représente une erreur relative de 1 % par rapport à la valeur de référence, mais nécessite un temps de calcul 10 fois moindre que celle-ci.

TABLEAU 4.1 – Erreur relative sur les trajectoires pour différents incréments de temps Δt

Incrément de temps Δt	Erreur relative
$\Delta t = 0.0001$	—
$\Delta t = 0.0005$	0.0056
$\Delta t = 0.001$	0.0123
$\Delta t = 0.005$	0.0957
$\Delta t = 0.01$	0.3179

Dans l'équation (4.6), l'argument de l'exponentielle est égal à $i\tau/2n^2$. La périodicité de 4π du terme $n = 1$ correspond approximativement à la distance entre les maximums de la figure 4.2.

Chapitre 5

Trajectoires bohmiennes de l'oscillateur quartique

5.1 Oscillateur quartique

L'oscillateur quartique représente l'oscillateur harmonique perturbé par une correction d'ordre 4. En d'autres termes, l'hamiltonien H de l'oscillateur quartique sera donné par l'hamiltonien H_0 de l'oscillateur harmonique additionné à une perturbation W du quatrième ordre :

$$H = H_0 + W = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \frac{m^2\omega^3}{\hbar}\lambda X^4, \quad (5.1)$$

où λ est sans dimension. Ainsi, nous déterminerons les valeurs de λ pour lesquelles la différence avec l'oscillateur harmonique non perturbé est non négligeable.

L'équation donnant la correction de premier ordre $|\chi_{1n}\rangle$ du vecteur propre $|E_n\rangle$ de

l'hamiltonien est [23]

$$|\chi_{1n}\rangle = \sum_{i \neq n} \frac{\langle E_i | W | E_n \rangle}{E_n - E_i} |E_i\rangle. \quad (5.2)$$

L'opérateur X peut être écrit en termes des opérateurs de création A^\dagger et d'annihilation A de la façon suivante :

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}} (A + A^\dagger). \quad (5.3)$$

Le commutateur de A et A^\dagger est donné par

$$[A, A^\dagger] = I, \quad (5.4)$$

donc

$$2A^\dagger A + I = 2A^\dagger A + \{AA^\dagger - A^\dagger A\} = A^\dagger A + AA^\dagger. \quad (5.5)$$

On peut donc développer le terme quartique comme

$$\begin{aligned}
(A + A^\dagger)^4 &= (A + A^\dagger)^2(A + A^\dagger)^2 \\
&= \{A^2 + AA^\dagger + A^\dagger A + (A^\dagger)^2\} \{A^2 + AA^\dagger + A^\dagger A + (A^\dagger)^2\} \\
&= \{A^2 + 2A^\dagger A + I + (A^\dagger)^2\} \{A^2 + 2A^\dagger A + I + (A^\dagger)^2\} \\
&= A^4 + 2A^2A^\dagger A + A^2 + A^2(A^\dagger)^2 + 2A^\dagger A^3 + 4A^\dagger AA^\dagger A + 2A^\dagger A + 2A^\dagger A(A^\dagger)^2 \\
&\quad + A^2 + 2A^\dagger A + I + (A^\dagger)^2 + (A^\dagger)^2 A^2 + 2(A^\dagger)^3 A + (A^\dagger)^2 + (A^\dagger)^4 \\
&= A^4 + 2A^2A^\dagger A + A^2(A^\dagger)^2 + 2A^2 + 2A^\dagger A^3 + 4A^\dagger AA^\dagger A + 2A^\dagger A(A^\dagger)^2 + 4A^\dagger A \\
&\quad + (A^\dagger)^2 A^2 + 2(A^\dagger)^3 A + (A^\dagger)^4 + 2(A^\dagger)^2 + I.
\end{aligned}$$

Ainsi, on obtient que

$$\begin{aligned}
\langle E_i | W | E_n \rangle &= \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} \lambda \langle E_i | X^4 | E_n \rangle \\
&= \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} \lambda \left(\frac{\hbar}{2\omega m} \right)^2 \langle E_i | (A + A^\dagger)^4 | E_n \rangle \\
&= \frac{\hbar \omega}{4} \lambda \{ \langle E_i | [A^4 + 2A^2A^\dagger A + A^2(A^\dagger)^2 + 2A^2] | E_n \rangle \\
&\quad + \langle E_i | [2A^\dagger A^3 + 4A^\dagger AA^\dagger A + 2A^\dagger A(A^\dagger)^2 + 4A^\dagger A] | E_n \rangle \\
&\quad + \langle E_i | [(A^\dagger)^2 A^2 + 2(A^\dagger)^3 A + (A^\dagger)^4 + 2(A^\dagger)^2 + I] | E_n \rangle \}. \quad (5.6)
\end{aligned}$$

Les opérateurs de création A^\dagger et d'annihilation A ont les propriétés suivantes :

$$A | E_n \rangle = \sqrt{n} | E_{n-1} \rangle, \quad (5.7)$$

$$A^\dagger | E_n \rangle = \sqrt{n+1} | E_{n+1} \rangle. \quad (5.8)$$

Ce faisant, pour le premier terme de l'addition d'opérateurs dans le "braket", on obtient

$$\begin{aligned}
A^4 |E_n\rangle &= A^4 A |E_n\rangle = \sqrt{n} A^4 A |E_{n-1}\rangle = \sqrt{n} \sqrt{n-1} A^2 A |E_{n-2}\rangle \\
&= \sqrt{n} \sqrt{n-1} \sqrt{n-2} A |E_{n-3}\rangle \\
&= \sqrt{n} \sqrt{n-1} \sqrt{n-2} \sqrt{n-3} |E_{n-4}\rangle \\
&\equiv a |E_{n-4}\rangle.
\end{aligned} \tag{5.9}$$

De la même façon, on trouve que

$$A^2(A^\dagger)A |E_n\rangle = n^{3/2} \sqrt{n-1} |E_{n-2}\rangle \equiv b |E_{n-2}\rangle, \tag{5.10}$$

$$A^2(A^\dagger)^2 |E_n\rangle = (n+1)(n+2) |E_n\rangle \equiv c |E_n\rangle, \tag{5.11}$$

$$A^2 |E_n\rangle = \sqrt{n} \sqrt{n-1} |E_{n-2}\rangle \equiv d |E_{n-2}\rangle, \tag{5.12}$$

$$A^\dagger A^3 |E_n\rangle = (n-2) \sqrt{n} \sqrt{n-1} |E_{n-2}\rangle \equiv e |E_{n-2}\rangle, \tag{5.13}$$

$$A^\dagger A A^\dagger A |E_n\rangle = n^2 |E_n\rangle \equiv f |E_n\rangle, \tag{5.14}$$

$$A^\dagger A (A^\dagger)^2 |E_n\rangle = \sqrt{n+1} (n+2)^{3/2} |E_{n+2}\rangle \equiv g |E_{n+2}\rangle, \tag{5.15}$$

$$A^\dagger A |E_n\rangle = n |E_n\rangle \equiv h |E_n\rangle, \tag{5.16}$$

$$(A^\dagger)^2 A^2 |E_n\rangle = (n)(n-1) |E_n\rangle \equiv l |E_n\rangle, \quad (5.17)$$

$$(A^\dagger)^3 A |E_n\rangle = n\sqrt{n+1}\sqrt{n+2} |E_{n+2}\rangle \equiv p |E_{n+2}\rangle, \quad (5.18)$$

$$(A^\dagger)^4 |E_n\rangle = \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+3}\sqrt{n+4} |E_{n+4}\rangle \equiv q |E_{n+4}\rangle, \quad (5.19)$$

$$(A^\dagger)^2 |E_n\rangle = \sqrt{n+1}\sqrt{n+2} |E_{n+2}\rangle \equiv r |E_{n+2}\rangle. \quad (5.20)$$

Dans l'équation (5.2), la sommation n'inclut pas les termes pour $i = n$. Il n'y aura donc que les termes $n-4$, $n-2$, $n+2$, et $n+4$ qui seront conservés dans le développement. En revenant à l'équation (5.2), et en insérant les résultats des équations (5.9) à (5.20), on obtient

$$\begin{aligned} |\chi_{1n}\rangle &= \sum_{i \neq n} \frac{\langle E_i | W | E_n \rangle}{E_n - E_i} |E_i\rangle \\ &= \frac{\langle E_{n-4} | W | E_n \rangle}{E_n - E_{n-4}} |E_{n-4}\rangle + \frac{\langle E_{n-2} | W | E_n \rangle}{E_n - E_{n-2}} |E_{n-2}\rangle \\ &\quad + \frac{\langle E_{n+2} | W | E_n \rangle}{E_n - E_{n+2}} |E_{n+2}\rangle + \frac{\langle E_{n+4} | W | E_n \rangle}{E_n - E_{n+4}} |E_{n+4}\rangle \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} \lambda \left\{ \frac{a}{E_n - E_{n-4}} |E_{n-4}\rangle + \frac{(2b + 2d + 2e)}{E_n - E_{n-2}} |E_{n-2}\rangle \right. \\ &\quad \left. + \frac{(2g + 2p + 2r)}{E_n - E_{n+2}} |E_{n+2}\rangle + \frac{q}{E_n - E_{n+4}} |E_{n+4}\rangle \right\}. \end{aligned}$$

En sachant que l'énergie de niveau n de l'oscillateur harmonique est donnée par

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega, \quad (5.21)$$

on a

$$\begin{aligned} |\chi_{1n}\rangle &= \frac{\omega\hbar}{4}\lambda \left\{ \frac{a}{(n+1/2)\hbar\omega - (n-4+1/2)\hbar\omega} |E_{n-4}\rangle + \frac{2b+2d+2e}{(n+1/2)\hbar\omega - (n-2+1/2)\hbar\omega} |E_{n-2}\rangle \right. \\ &\quad \left. + \frac{2g+2p+2r}{(n+1/2)\hbar\omega - (n+2+1/2)\hbar\omega} |E_{n+2}\rangle + \frac{q}{(n+1/2)\hbar\omega - (n+4+1/2)\hbar\omega} |E_{n+4}\rangle \right\} \\ &= \frac{\omega\hbar}{4}\lambda \left\{ \frac{a}{4\hbar\omega} |E_{n-4}\rangle + \frac{2b+2d+2e}{2\hbar\omega} |E_{n-2}\rangle + \frac{2g+2p+2r}{-2\hbar\omega} |E_{n+2}\rangle + \frac{q}{-4\hbar\omega} |E_{n+4}\rangle \right\} \\ &= \lambda \left[\frac{a}{16} |E_{n-4}\rangle + \frac{b+d+e}{4} |E_{n-2}\rangle - \frac{g+p+r}{4} |E_{n+2}\rangle - \frac{q}{16} |E_{n+4}\rangle \right]. \end{aligned}$$

Finalement, en utilisant les fonctions propres

$$\psi_n(\xi) \equiv \langle \xi | E_n \rangle = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{2^n n!} \right]^{1/2} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \quad (5.22)$$

on obtient

$$\begin{aligned}
\langle \xi | \chi_{1n} \rangle &= \left[\frac{a}{16} \psi_{n-4}(\xi) + \frac{b+d+e}{4} \psi_{n-2}(\xi) - \frac{g+p+r}{4} \psi_{n+2}(\xi) - \frac{q}{16} \psi_{n+4}(\xi) \right] \lambda \\
&= \left[\frac{\sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-2}\sqrt{n-3}}{16 \times \{2^{n-4}(n-4)!\}^{1/2}} H_{n-4}(\xi) \right. \\
&\quad + \frac{(2n-1)\sqrt{n}\sqrt{n-1}}{4 \times \{2^{n-2}(n-2)!\}^{1/2}} H_{n-2}(\xi) \\
&\quad - \frac{(2n+3)\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}}{4 \times \{2^{n+2}(n+2)!\}^{1/2}} H_{n+2}(\xi) \\
&\quad \left. - \frac{\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+3}\sqrt{n+4}}{16 \times \{2^{n+4}(n+4)!\}^{1/2}} H_{n+4}(\xi) \right] \lambda \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} \quad (5.23)
\end{aligned}$$

En utilisant l'équation (5.6) et les résultats des équations (5.9) à (5.20), la correction de premier ordre ε_{1n} de la valeur propre de l'énergie E_n est donnée par

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{1n} = \langle E_n | W | E_n \rangle &= \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} \lambda \langle E_n | X^4 | E_n \rangle \\
&= \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} \lambda \left(\frac{\hbar}{2\omega m} \right)^2 \langle E_n | (A + A^\dagger)^4 | E_n \rangle \\
&= \frac{\hbar \omega}{4} \lambda \langle E_n | (n+1)(n+2) + 4n^2 + 4n + n(n-1) + 1 | E_n \rangle \\
&= \frac{\hbar \omega}{4} \lambda (6n^2 + 6n + 3) \\
&= \frac{3\hbar \omega}{2} \lambda \left((n + 1/2)^2 + 1/4 \right).
\end{aligned}$$

Quant à la correction de deuxième ordre ε_{2n} , elle est donnée par

$$\varepsilon_{2n} = \sum_{i \neq n} \frac{|\langle E_i | W | E_n \rangle|^2}{E_n - E_i}. \quad (5.24)$$

En insérant les résultats des équations (5.9) à (5.20), on obtient

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{2n} &= \sum_{i \neq n} \frac{|\langle E_i | W | E_n \rangle|^2}{E_n - E_i} \\
&= \frac{|\langle E_{n-4} | W | E_n \rangle|^2}{E_n - E_{n-4}} + \frac{|\langle E_{n-2} | W | E_n \rangle|^2}{E_n - E_{n-2}} \\
&\quad + \frac{|\langle E_{n+2} | W | E_n \rangle|^2}{E_n - E_{n+2}} + \frac{|\langle E_{n+4} | W | E_n \rangle|^2}{E_n - E_{n+4}} \\
&= \lambda^2 \hbar \omega \left\{ \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{64} + \frac{n(n-1)(2n-1)^2}{8} \right. \\
&\quad \left. - \frac{(n+1)(n+2)(2n+3)^2}{8} - \frac{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}{64} \right\} \\
&= -\frac{\lambda^2 \hbar \omega}{8} \{34n^3 + 51n^2 + 59n + 21\}. \tag{5.25}
\end{aligned}$$

Au premier ordre de la théorie des perturbations, la fonction $\Psi_n(\xi)$ et l'énergie propre E'_n de l'oscillateur harmonique perturbé, ou oscillateur quartique, seront données par

$$\Psi_n(\xi) = \psi_n(\xi) + \langle \xi | \chi_{1n} \rangle, \tag{5.26}$$

$$E'_n = E_n + \varepsilon_{1n} = (n + 1/2)\hbar\omega + \frac{3\hbar\omega}{2}\lambda \{(n + 1/2)^2 + 1/4\}. \tag{5.27}$$

Supposons que la fonction d'onde initiale de l'oscillateur quartique soit donnée par

$$\Psi_n(\xi) = \sum_n c_n \Psi_n(\xi). \tag{5.28}$$

Alors la fonction d'onde au temps t sera

$$\Psi(\xi, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\xi) e^{-iE_n' t/\hbar}, \quad (5.29)$$

À partir des équations (5.22) et (5.23), on obtient donc que

$$\begin{aligned} \Psi(\xi, t) = & \sum_n c_n \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{2^n n!} \right]^{1/2} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) e^{-iE_n' t/\hbar} \\ & + \sum_n c_n e^{-\xi^2/2} e^{-iE_n' t/\hbar} \left[\frac{\sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-2}\sqrt{n-3}}{16 \times \{2^{n-4}(n-4)!\}^{1/2}} H_{n-4}(\xi) \right. \\ & + \frac{(2n-1)\sqrt{n}\sqrt{n-1}}{4 \times \{2^{n-2}(n-2)!\}^{1/2}} H_{n-2}(\xi) \\ & - \frac{(2n+3)\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}}{4 \times \{2^{n+2}(n+2)!\}^{1/2}} H_{n+2}(\xi) \\ & \left. - \frac{\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+3}\sqrt{n+4}}{16 \times \{2^{n+4}(n+4)!\}^{1/2}} H_{n+4}(\xi) \right] \lambda \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4}. \quad (5.30) \end{aligned}$$

L'équation qui nous donne la vitesse bohmienne est

$$v_\xi = \frac{d\xi}{d\tau} = \text{Im} \left\{ \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \right\},$$

où $\tau = \omega t$. Sachant que

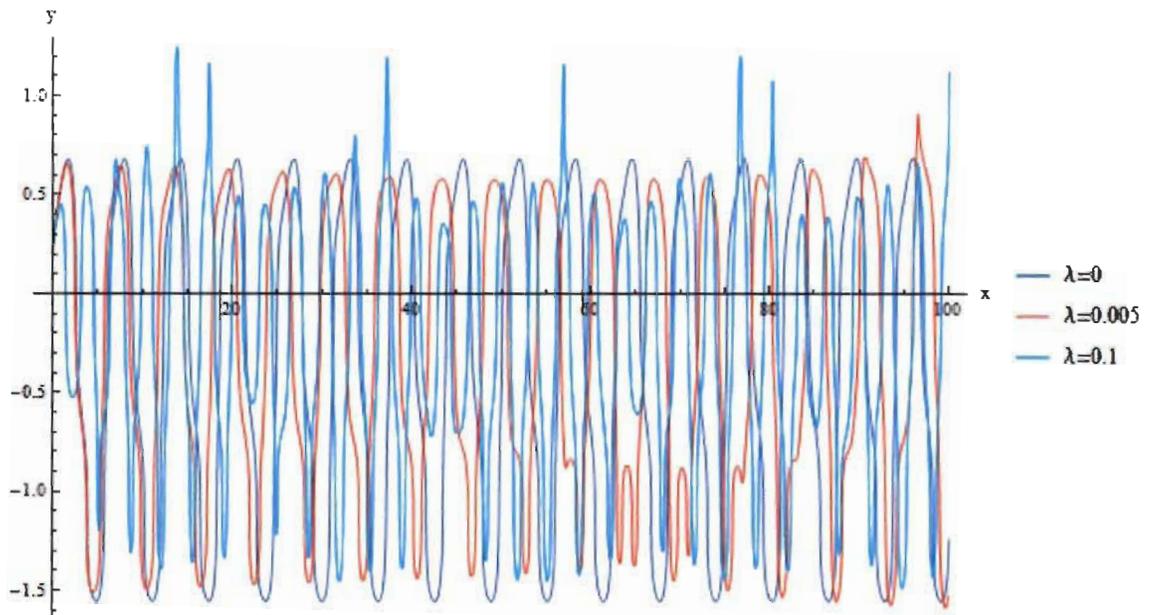
$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left\{ e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \right\} &= \left\{ -\xi H_n(\xi) + \frac{dH_n}{d\xi} \right\} e^{-\xi^2/2} \\ &= \left\{ n H_{n-1}(\xi) - \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) \right\} e^{-\xi^2/2}, \end{aligned}$$

alors la dérivée de la fonction Ψ sera

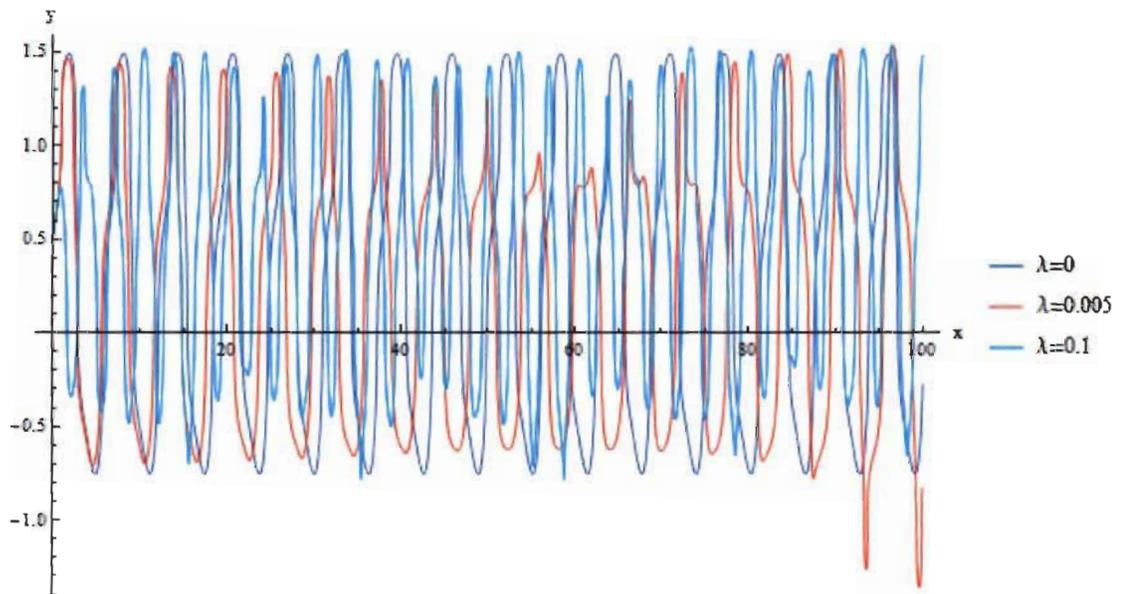
$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Psi}{\partial \xi} = & \sum_n c_n \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} \frac{1}{2^n n!} \right]^{1/2} e^{-\xi^2/2} \left\{ n H_{n-1} - \frac{1}{2} H_{n+1} \right\} e^{-iE_n t/\hbar} \\
& + \sum_n c_n e^{-\xi^2/2} e^{-iE_n t/\hbar} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \lambda \left[\frac{\sqrt{n} \sqrt{n-1} \sqrt{n-2} \sqrt{n-3}}{16 \times \{2^{n-4} (n-4)!\}^{1/2}} \left\{ (n-4) H_{n-5} - \frac{1}{2} H_{n-3} \right\} \right. \\
& + \frac{(2n-1) \sqrt{n} \sqrt{n-1}}{4 \times \{2^{n-2} (n-2)!\}^{1/2}} \left\{ (n-2) H_{n-3} - \frac{1}{2} H_{n-1} \right\} \\
& - \frac{(2n+3) \sqrt{n+1} \sqrt{n+2}}{4 \times \{2^{n+2} (n+2)!\}^{1/2}} \left\{ (n+2) H_{n+1} - \frac{1}{2} H_{n+3} \right\} \\
& \left. - \frac{\sqrt{n+1} \sqrt{n+2} \sqrt{n+3} \sqrt{n+4}}{16 \times \{2^{n+4} (n+4)!\}^{1/2}} \left\{ (n+4) H_{n+3} - \frac{1}{2} H_{n+5} \right\} \right]. \tag{5.31}
\end{aligned}$$

5.2 Calcul de trajectoires

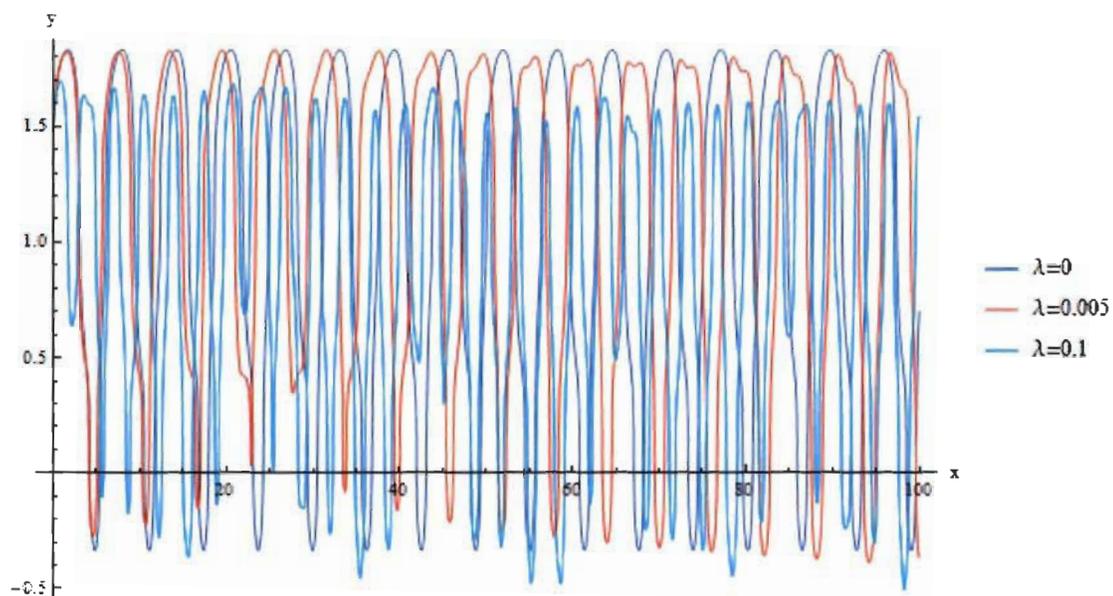
Les trajectoires bohmiennes de l'oscillateur quartique pour différentes valeurs de λ et différentes positions initiales y_0 sont montrées à la figure 5.1. Les trajectoires ont été calculées avec une superposition de 3 états propres, c'est-à-dire une sommation de 3 termes dans les équations (5.30) et (5.31). En bleu, c'est l'oscillateur harmonique, c'est-à-dire que $\lambda = 0$. En rouge, $\lambda = 0.005$. On remarque que pour les premières périodes, les deux sont similaires, et débutent par la suite à diverger. En cyan, $\lambda = 0.1$. On voit la forte différence avec l'oscillateur harmonique.



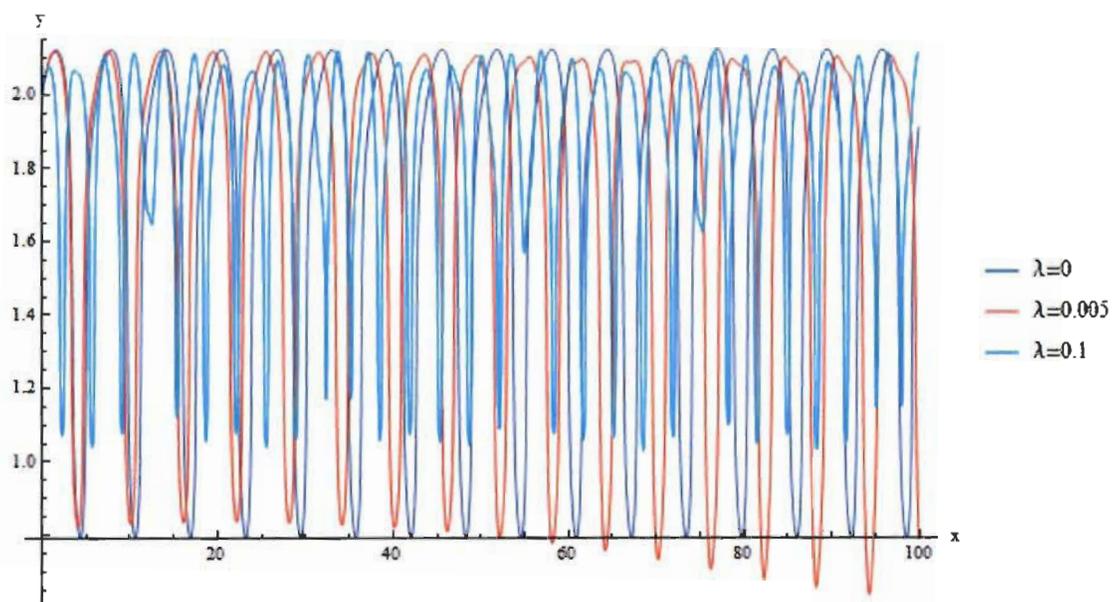
(a) $y_0 = 0.2$



(b) $y_0 = 0.5$



(c) $y_0 = 1.5$



(d) $y_0 = 2.0$

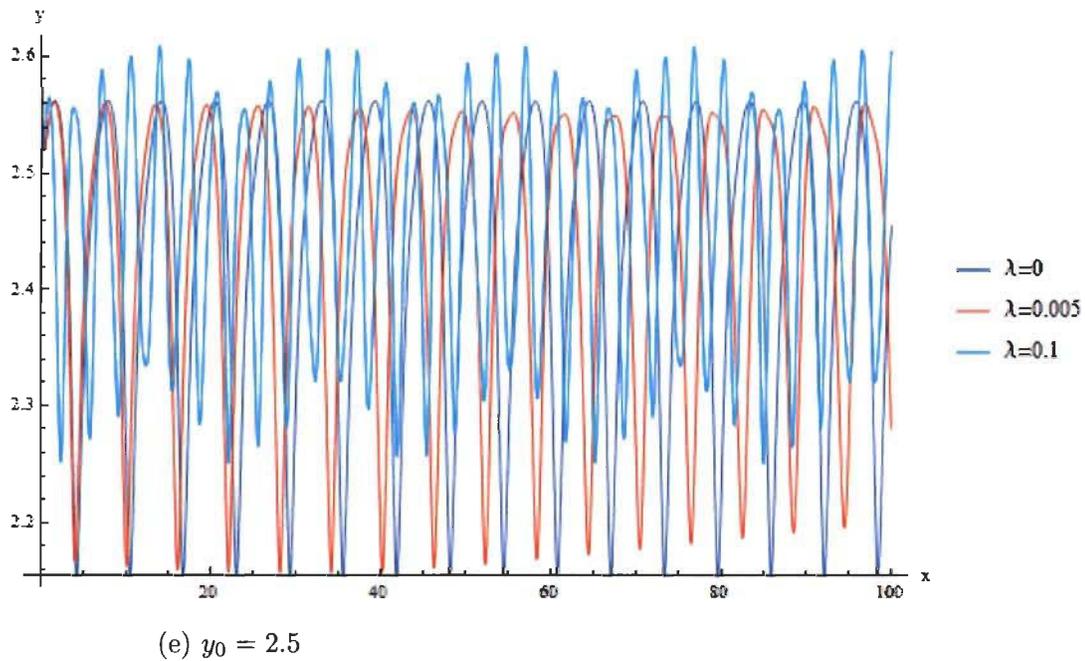
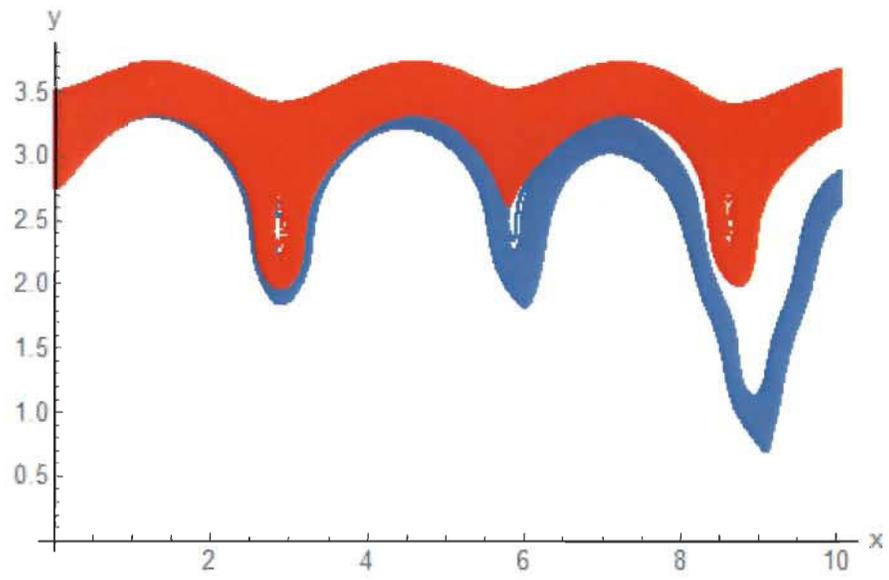


FIGURE 5.1 – Trajectoires bohmiennes de l'oscillateur quartique pour différentes valeurs de position initiale.

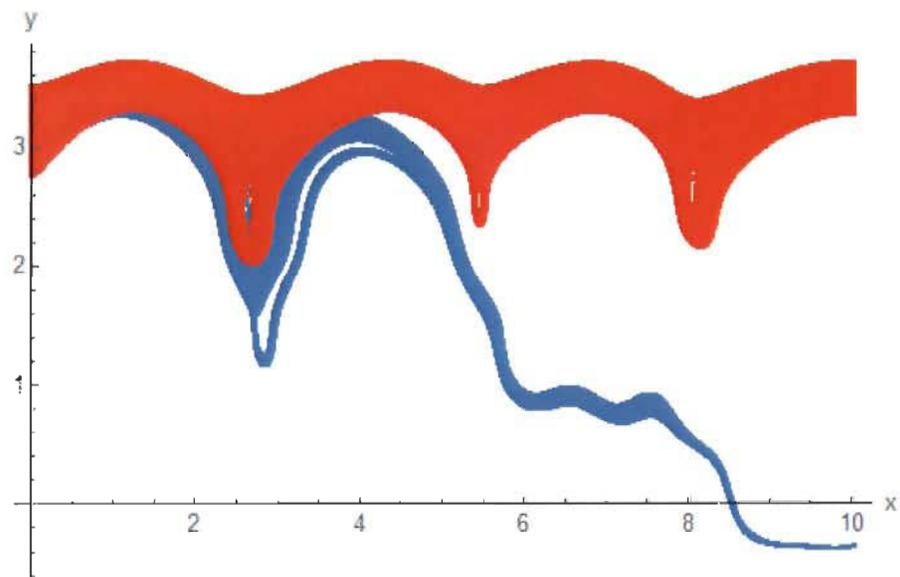
Comme montré à l'équation (5.25), la correction de deuxième ordre pour l'énergie de l'oscillateur quartique est

$$\varepsilon_{2n} = -\frac{\lambda^2 \hbar \omega}{8} \{34n^3 + 51n^2 + 59n + 21\}. \quad (5.32)$$

Ainsi, calculons les trajectoires bohmiennes pour l'oscillateur quartique en tenant compte de la correction de deuxième ordre, et comparons les résultats avec ceux obtenus plus haut, où celle-ci était négligée. La figure 5.2 montre les résultats. En rouge, ce sont les trajectoires calculées en ne prenant que la correction de premier ordre de l'énergie. En bleu, la correction de deuxième ordre est ajoutée. Ces calculs ont été faits pour 50 trajectoires, avec un incrément de temps $\Delta t = 0.001$.



(a) $\lambda = 0.005$



(b) $\lambda = 0.01$

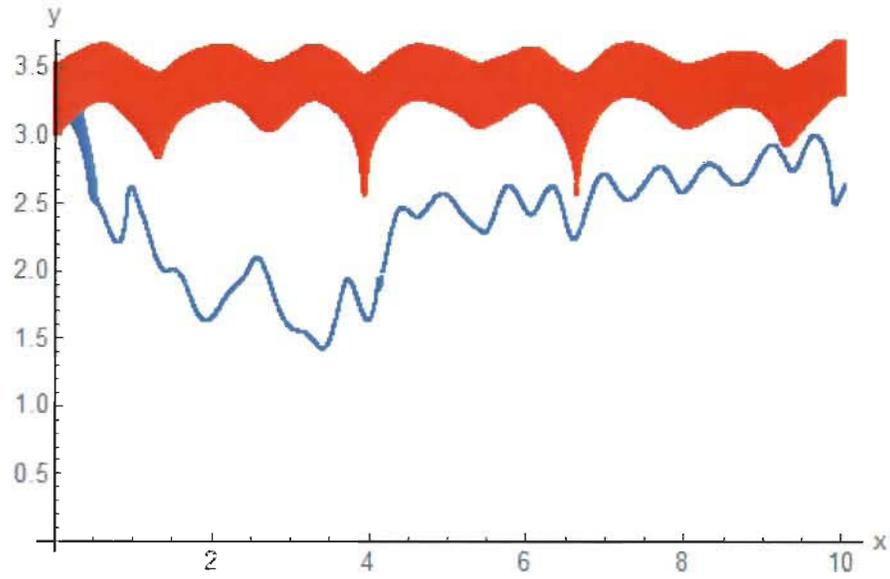
(c) $\lambda = 0.1$

FIGURE 5.2 – Comparaison entre les trajectoires bohmiennes de l'oscillateur quartique avec correction de l'énergie au premier et deuxième ordre, pour différents λ

On remarque la forte différence entre les courbes de l'oscillateur harmonique et celles de l'oscillateur quartique pour des valeurs de λ qui s'éloignent de 0. Ceci s'explique par le calcul du rapport entre les corrections d'énergie de premier et de deuxième ordre.

$$\left| \frac{\varepsilon_{2n}}{\varepsilon_{1n}} \right| = \frac{\frac{\lambda^2 \hbar \omega}{8} \{34n^3 + 51n^2 + 59n + 21\}}{\frac{3\lambda \hbar \omega}{2} \{(n + 1/2)^2 + 1/4\}} = \frac{\lambda \{34n^3 + 51n^2 + 59n + 21\}}{12 \{(n + 1/2)^2 + 1/4\}}. \quad (5.33)$$

Si on évalue ce rapport pour les différentes valeurs de λ utilisées avec $n = 3$, qui est le dernier niveau d'énergie pris en compte dans notre calcul, on obtient

$$\left| \frac{\varepsilon_{2n}}{\varepsilon_{1n}} \right| = \begin{cases} 0.05 & \text{si } \lambda = 0.005 \\ 0.1 & \text{si } \lambda = 0.01 \\ 1 & \text{si } \lambda = 0.1 \end{cases} ,$$

Ainsi, pour une valeur de λ de 0.1, la correction de deuxième ordre équivaut à celle de premier ordre, ce qui cause la différence entre les trajectoires calculées lorsque celle-ci est négligée ou non. C'est la raison pour laquelle nous utiliserons une valeur de λ faible, soit de 0.005, pour le calcul de la densité de probabilité dans la prochaine section. Cela nous permettra d'avoir une bonne approximation de la fonction d'onde en négligeant la correction de deuxième ordre, ce qui réduira évidemment le temps de calcul.

5.3 Densité de probabilité

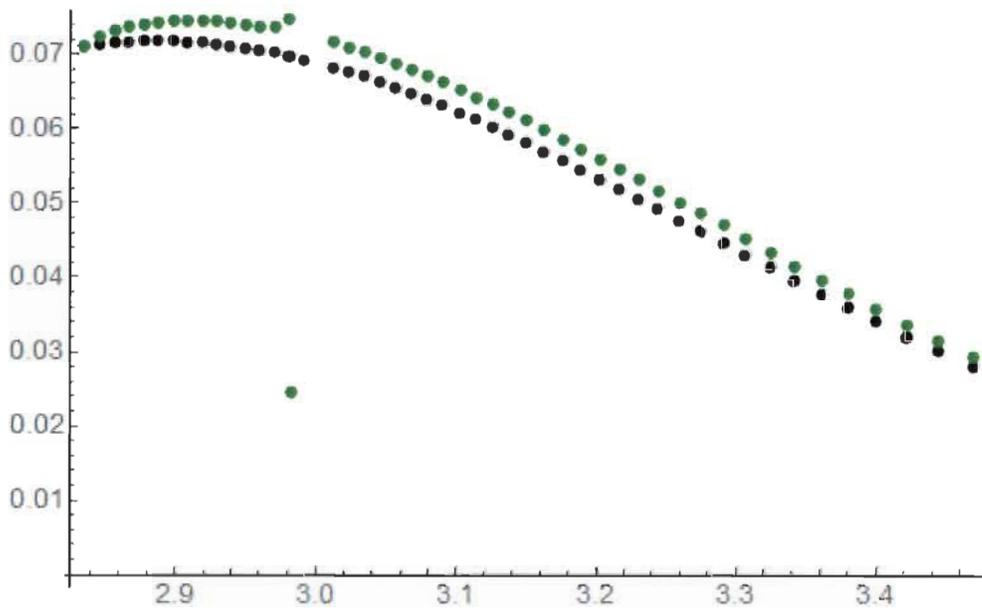
Comme mentionné dans l'introduction, la densité de probabilité ρ associée aux trajectoires bohmiennes suit la probabilité quantique $P = |\Psi\Psi^*|$ lorsque les particules sont initialement distribuées selon le carré de la fonction d'onde. Ceci, rappelons-le, correspond à une méconnaissance fondamentale de la position initiale de la particule. La densité et la probabilité quantique ont été comparées à différents temps, et ce pour deux valeurs différentes de λ . Ces deux valeurs sont $\lambda = 0$, ce qui correspond à l'oscillateur harmonique, et $\lambda = 0.005$. Dans les deux cas, les valeurs initiales des positions sont distribuées selon la probabilité quantique.

Pour calculer la densité de probabilité associée aux valeurs finales des trajectoires, nous avons suivi l'algorithme suivant :

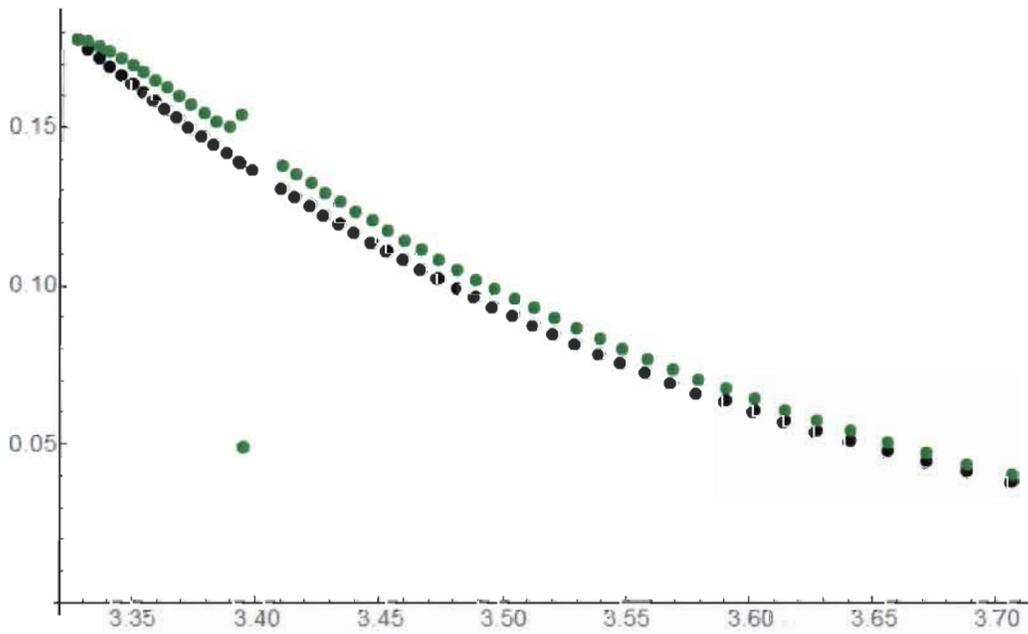
1. On calcule d'abord les trajectoires bohmiennes en conservant dans une liste les valeurs finales de ξ à un temps t choisi
2. ξ_0 est le premier point de cette liste
3. ξ_1 est le deuxième point de cette liste
4. On pose $\Delta\xi_1 = \xi_1 - \xi_0$
5. Pour tout l , on pose $\Delta\xi_l = \xi_l - \xi_{l-1}$
6. La densité est donnée par $\rho(\xi_l, t) = P(\xi_0, t)\Delta\xi_0/\Delta\xi_l$, où $P(\xi_0, t) = |\psi(\xi_0, t)\psi^*(\xi_0, t)|$

Cet algorithme identifie donc ρ et P en un point, de manière à comparer leurs valeurs respectives aux autres points finaux des trajectoires.

La comparaison entre la densité et la probabilité quantique est montrée à la figure 5.3. Le calcul a été fait pour 50 trajectoires bohmiennes, avec un incrément de temps $\Delta t = 0.005$. L'axe vertical correspond aux valeurs de la densité et de la probabilité quantique, calculées selon les valeurs finales des trajectoires, montrées sur l'axe horizontal. La courbe noire représente la probabilité quantique. En vert, c'est la densité des trajectoires bohmiennes.



(a) $t = 10$



(b) $t = 30$

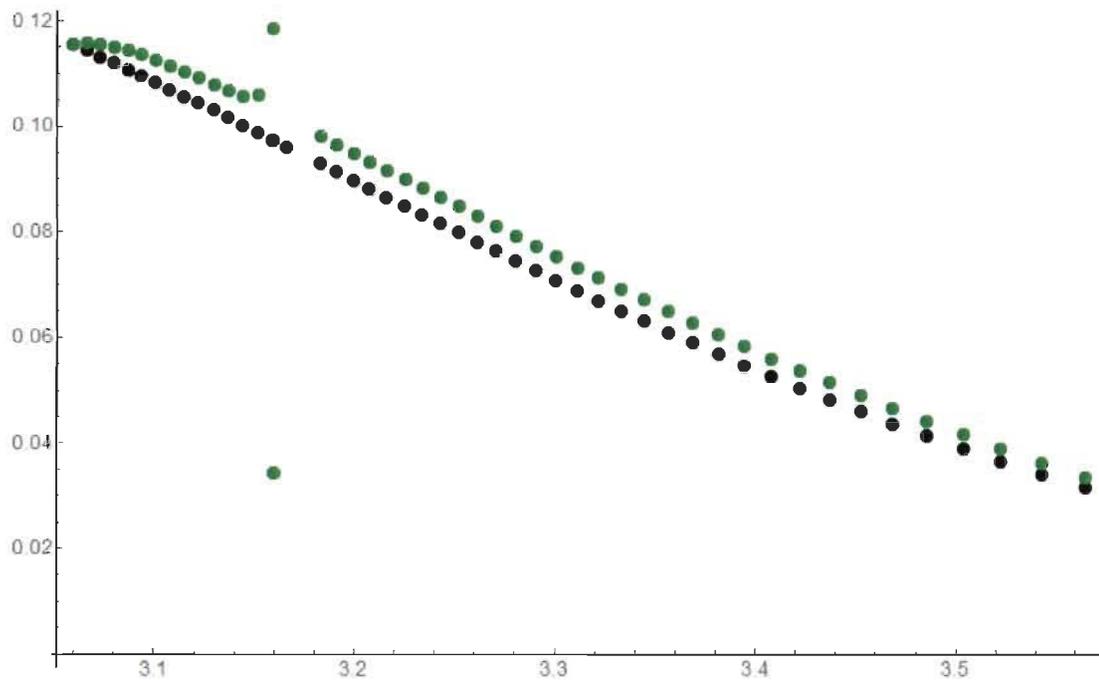
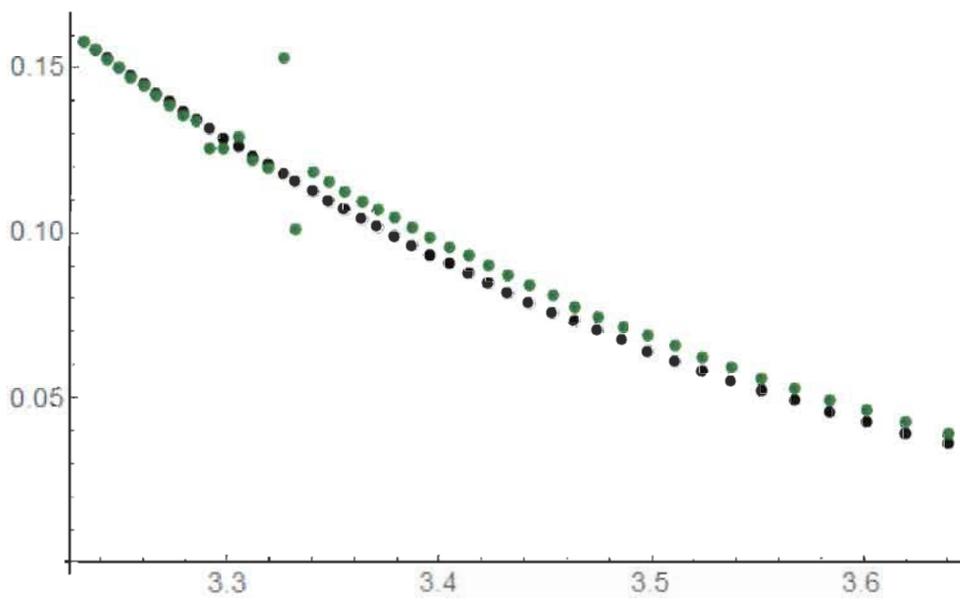
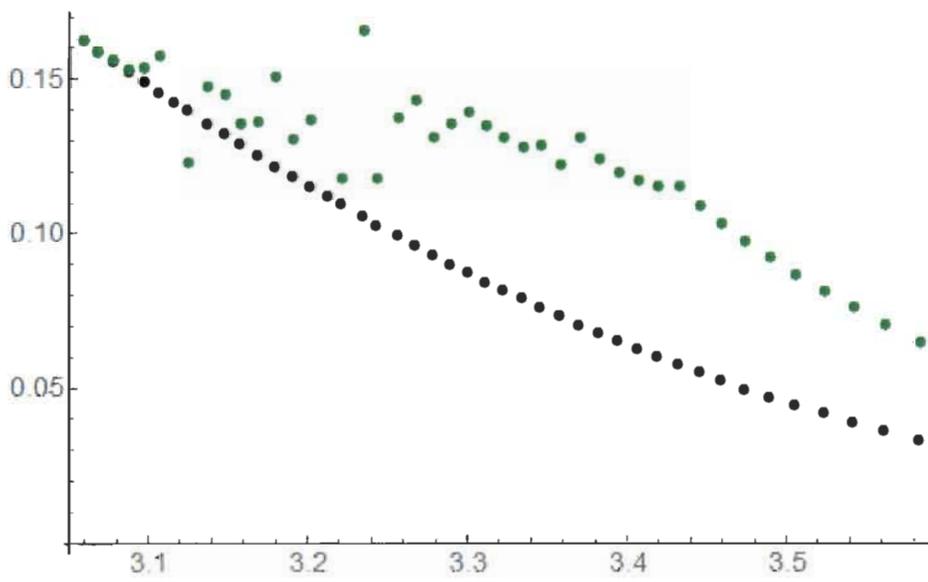
(c) $t = 100$

FIGURE 5.3 – Comparaison entre la densité des trajectoires bohmiennes et la probabilité quantique en fonction des valeurs finales des trajectoires, pour $\lambda = 0$. En noir, la probabilité quantique. En vert, la densité des trajectoires bohmiennes.

Le même calcul a été fait, mais cette fois avec $\lambda = 0.005$. Les résultats sont montrés à la figure 5.4. Encore une fois, l'axe vertical correspond aux valeurs de la densité et de la probabilité quantique, calculées selon les valeurs finales des trajectoires, montrées sur l'axe horizontal. La courbe noire représente la probabilité quantique. En vert, c'est la densité des trajectoires bohmiennes.



(a) $t = 10$



(b) $t = 30$

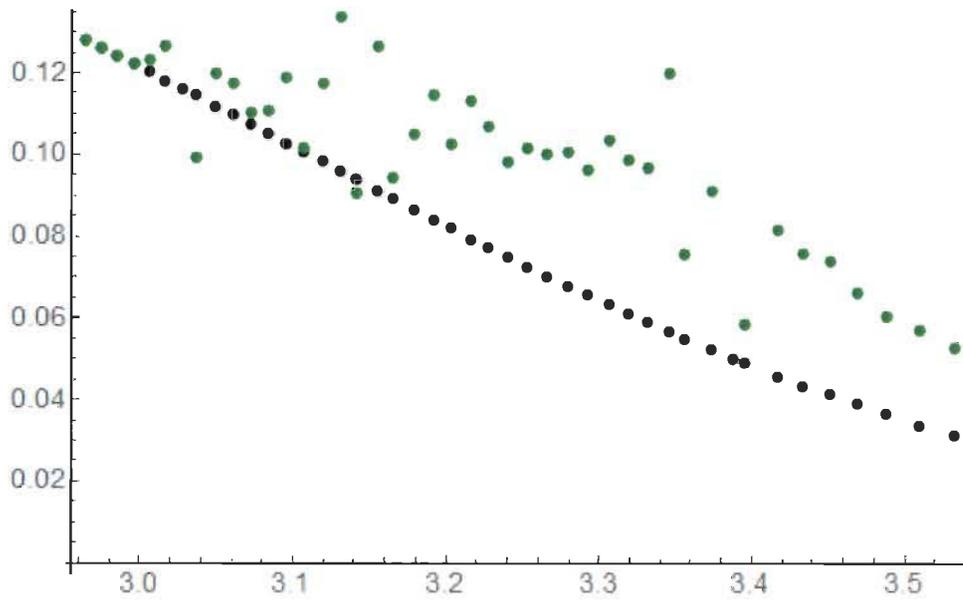
(c) $t = 100$

FIGURE 5.4 – Comparaison entre la densité des trajectoires bohmiennes et la probabilité quantique, pour $\lambda = 0.005$. En noir, la probabilité quantique. En vert, la densité des trajectoires bohmiennes.

L'erreur relative entre la densité et la probabilité quantique de tous les points finaux a été calculée pour les deux valeurs de λ étudiées. Les résultats sont inscrits dans le tableau 5.1.

TABLEAU 5.1 – Erreur relative entre la densité des trajectoires bohmiennes et la probabilité quantique, avec $\Delta t = 0.005$.

Temps final t	$\lambda = 0$	$\lambda = 0.005$
$t = 10$	0.0061	0.045
$t = 30$	0.120	0.362
$t = 100$	0.128	0.299

Comme nous le voyons, l'erreur relative entre la densité des trajectoires et la

probabilité quantique augmente avec le temps. Évidemment, un incrément de temps Δt diminué nous aurait permis d'avoir des résultats encore plus précis, mais le temps de calcul étant déjà long (environ 24 heures pour chaque valeur de λ), nous avons opté pour $\Delta t = 0.005$. De plus, les sauts aléatoires de certains points sur les graphiques sont également causés par la valeur "trop grande" de l'incrément de temps Δt . En général toutefois, le calcul fonctionne assez bien, et montre que la densité des trajectoires bohmiennes correspond avec la probabilité quantique, dans les deux cas étudiés, soit l'oscillateur harmonique et l'oscillateur quartique.

Chapitre 6

Perspectives d'une théorie quantique hors d'équilibre

6.1 Temps de relaxation pour un système qui n'est pas à l'équilibre

Comme nous l'avons mentionné dans la section 2.2, le carré de la fonction d'onde $|\psi|^2$ et la densité ρ obéissent à la même équation. Ce faisant, une distribution initiale $\rho(q, t_0) = |\psi(q, t_0)|^2$, considérée “à l'équilibre”, va nécessairement évoluer vers $\rho(q, t) = |\psi(q, t)|^2$. De plus, la théorie de l'onde pilote reproduit les résultats de la mécanique quantique pour une telle distribution initiale [10, 24]. Or, on peut imaginer une distribution initiale pour laquelle $\rho(q, t_0) \neq |\psi(q, t_0)|^2$. À ce moment, il y aura un certain temps de relaxation pour que la densité ρ soit égale au carré de la fonction d'onde. Ainsi, la mécanique quantique est alors vue comme une situation “à l'équilibre” d'une théorie plus vaste, c'est-à-dire la théorie de l'onde pilote [25]. La relaxation vers $\rho(q, t) = |\psi(q, t)|^2$ est donc analogue à la relaxation thermique en physique statistique. L'approche à l'équilibre peut être caractérisée par la fonction H

suivante

$$H = \int dq \rho \ln(\rho/\rho_{QT}), \quad (6.1)$$

où $\rho_{QT} = |\psi|^2$. Le minimum $H = 0$ correspond au point où $\rho = \rho_{QT}$, puisque, alors, $\ln(\rho/\rho_{QT}) = \ln(1) = 0$.

La méthode utilisée pour calculer ρ est la suivante. Au lieu de résoudre l'équation (2.18), on se sert du fait que la fonction

$$f(x, y, t) \equiv \frac{\rho(x, y, t)}{\rho_{QT}(x, y, t)}, \quad (6.2)$$

est constante le long des trajectoires bohmiennes. Donc, en particulier, on a que

$$f(x_0, y_0, 0) = f(x, y, t), \quad (6.3)$$

où

$$f(x_0, y_0, 0) \equiv \frac{\rho(x_0, y_0, 0)}{\rho_{QT}(x_0, y_0, 0)}. \quad (6.4)$$

Ainsi, on obtient que

$$\rho(x, y, t) = \rho_{QT}(x, y, t)f(x_0, y_0, 0). \quad (6.5)$$

En partant d'une distribution initiale (x_0, y_0) , et en calculant les trajectoires bohmiennes jusqu'à (x, y) , on peut ainsi se servir de l'équation (6.5) pour déterminer $\rho(x, y, t)$. En effet, on connaît la valeur initiale de ρ , et on connaît la valeur de ρ_{QT} en tout temps. La façon la plus précise de le faire est d'effectuer la méthode de *backtracking* exposée dans un article de Valentini et Westman [25]. Celle-ci consiste à d'abord initialiser les trajectoires à (x, y) au temps t , et par la suite calculer les trajectoires bohmiennes jusqu'à (x_0, y_0) au temps $t = 0$, afin de déterminer la fonction $f(x_0, y_0, 0)$. Avec celle-ci, on peut obtenir $\rho(x, y, t)$ de l'équation (6.5).

Le désavantage de cette façon de faire est qu'on doit calculer toutes les trajectoires sur tout l'intervalle de t à $t = 0$, pour chaque valeur désirée de t . Malgré ce temps de calcul supplémentaire, cette méthode est meilleure en raison de l'uniformité de la densité $\rho(x, y, t)$ obtenue.

Valentini a calculé ce temps de relaxation pour l'oscillateur harmonique, avec une superposition de 4 et 25 états d'énergie. Pour 25 états d'énergie, le calcul donne un temps de relaxation d'environ 5 fois la période de la fonction d'onde qui est 2π . La fonction H donnée à l'équation (6.1) est exponentiellement décroissante, avec environ 1 % de sa valeur initiale après 5 fois la période. On se rappelle que cette fonction met en évidence la différence entre ρ et ρ_{QT} . On peut ainsi supposer que pour un temps de relaxation plus grand, la fonction H sera encore plus réduite, montrant que ρ tend bel et bien vers ρ_{QT} .

Pour une superposition de 4 états d'énergie, Valentini a obtenu un résultat intéressant. La fonction H , même si elle décroît exponentiellement, est encore à 12 % de sa valeur initiale après un temps de relaxation de 50 fois la période. Cette observation pourrait avoir des conséquences détectables expérimentalement. En effet, considérons une époque avant l'inflation cosmique, époque où il aurait été possible qu'un si petit nombre (4) d'états d'énergie superposés au-dessus de l'énergie du vide aient pu exister. Une trace de la dilatation de ce système vers l'équilibre pourrait ainsi être

délectable aujourd'hui, nous permettant de vérifier expérimentalement la théorie de l'onde pilote. Toutefois, ce résidu de l'état hors équilibre serait assurément faible, et même s'il existe, ne serait pas nécessairement mesurable.

6.2 Théorie quantique hors d'équilibre : Applications possibles

La mécanique quantique, telle que l'on observe aujourd'hui, pourrait n'être qu'un état "à l'équilibre" d'une théorie plus vaste : la théorie de l'onde pilote. La loi de Born, voulant que $\rho = |\psi|^2$ ne serait donc pas une loi générale, mais bien un état de relaxation à partir d'un système où $\rho \neq |\psi|^2$. De nombreuses applications physiques seraient disponibles pour un tel système. Le physicien Antony Valentini [26] les a résumées dans un article paru en 2002.

Signaux instantanés

La première possibilité d'une mécanique quantique hors d'équilibre serait la possibilité d'envoyer des signaux instantanés. En effet, comme le décrit Valentini, soit des paires de particules, notées A et B, intriquées et initialisées de façon qu'elles ne soient pas à l'équilibre. Alors, la densité de probabilité associée à la particule A dépendra des perturbations faites à la particule B, peu importe comment celles-ci sont séparées, d'où la possibilité d'envoyer des signaux de B à A.

L'existence de signaux instantanés est problématique si elle est conjuguée au principe de relativité. En effet, un signal instantané correspond, dans d'autres référentiels de Lorentz, à un signal se déplaçant inversement dans le temps. Le principe de cau-

salité est alors violé. Bohm et Hiley [14] notent qu'on peut résoudre le problème en introduisant un référentiel privilégié. L'invariance de Lorentz ne tient plus, et les signaux instantanés n'ont lieu que dans le référentiel privilégié. Il n'y a pas de référentiels équivalents où ils se déplacent inversement dans le temps.

Violation du principe d'incertitude

Le principe d'incertitude d'Heisenberg stipule qu'il est impossible de mesurer un système avec une précision arbitraire sans le perturber. Toutefois, un système hors d'équilibre pourrait nous le permettre.

En effet, il suffirait de se servir de particules ayant une fonction d'onde connue, par exemple $g_0(y)$, et une densité $\pi_0(y)$ connue également, mais non à l'équilibre, c'est-à-dire que $\pi_0(y) \neq |g_0(y)|^2$. Le paramètre y peut ici être vu comme la position du "pointeur" des particules.

Puis, prenons des particules cette fois à l'équilibre, avec une fonction d'onde $\psi_0(x)$ et une densité $\rho_0(x)$, et où $\rho_0(x) = |\psi_0(x)|^2$. Ces particules correspondent au système étudié.

Si la distribution $\pi_0(y)$ est suffisamment étroite, on pourrait alors mesurer la position x sans perturber la fonction d'onde $\psi_0(x)$, ce qui est en complète violation du principe d'incertitude.

Distinction d'états quantiques non orthogonaux

En mécanique quantique standard, deux états $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ non orthogonaux, c'est-à-dire que $\langle\psi_1|\psi_2\rangle \neq 0$, ne sont pas distinguables sans les perturber.

Toutefois, pour une physique quantique qui n'est pas à l'équilibre, ce n'est plus le cas. En effet, pour deux états distincts $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$, les vitesses associées \vec{v}_1 et \vec{v}_2 données par la théorie de l'onde pilote ne seront pas, en général, égales, même si $\langle\psi_1|\psi_2\rangle \neq 0$. Ce faisant, les trajectoires obtenues $x_1(t)$ et $x_2(t)$, associées respectivement à $\psi_1(x, t)$ et $\psi_2(x, t)$ seront généralement différentes si $\psi_1(x, 0) \neq \psi_2(x, 0)$. Une mesure de ces trajectoires nous permettrait donc de distinguer les états $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sans les perturber, et ce à une précision arbitraire.

Rapidité accrue des ordinateurs quantiques

Considérons un ordinateur quantique, où chaque résultat est encodé par un nombre n , et conservé selon une énergie propre du système E_n . Cette énergie est associée à celle d'une particule sans spin, une composante de l'ordinateur. Soit la fonction $\psi(x, t)$, décrivant la superposition de N fonctions propres $\phi_n(x)$ de cette particule, et ce après que l'ordinateur ait effectué son calcul. Cette fonction $\psi(x, t)$ sera

$$\psi(x, t) = \sum_{n \in S} \phi_n(x) e^{-iE_n t}, \quad (6.6)$$

où S est un ensemble inconnu de N nombres quantiques. On sait qu'en mécanique quantique standard, chaque mesure engendrera une seule valeur d'énergie propre E_n . Pour connaître les autres, il faut ainsi effectuer plusieurs autres mesures.

Toutefois, comme mentionné plus haut, il serait possible, avec un système hors d'équilibre, de mesurer $x(t)$ sans perturber $\psi(x, t)$. Ainsi, on pourrait connaître l'ensemble S de nombre quantiques. En effet, il nous faudrait résoudre l'équation de la vitesse $\dot{x} = \text{Im} \left(\frac{\nabla \psi}{\psi} \right)$ à N temps, nous donnant ainsi accès aux N nombres quantiques n . L'ordinateur aurait donc calculé une seule fois, en résolvant les N équations de vitesse. Cette capacité ferait en sorte que le temps de calcul serait inférieur à n'importe quel ordinateur classique ou quantique.

Rappelons que toutes ces possibilités ne peuvent être réalisées que si l'on dispose d'une distribution quantique hors d'équilibre, ce qu'on n'a pour l'instant jamais observé.

Chapitre 7

Conclusion

La mécanique bohmiennne est une théorie qui nous permet de comprendre les phénomènes de l'infiniment petit d'une façon beaucoup plus intuitive que la mécanique quantique standard. En effet, les particules y ont une position et une vitesse bien définies, ce qui leur donne des trajectoires calculables, de façon analogue à la mécanique classique dont nous faisons l'expérience quotidiennement. De plus, la mécanique bohmiennne reproduit les résultats de la mécanique quantique standard. Toutefois, il est clair qu'elle nécessite encore d'être affinée, en particulier dans ce qui a trait au champ quantique et à sa non-localité, afin d'être comprise dans un cadre relativiste.

Dans ce mémoire, nous avons d'abord calculé les trajectoires bohmiennes pour un oscillateur harmonique tronqué par une fente linéaire, et ce de deux façons différentes. La méthode du propagateur s'est avérée beaucoup plus efficace que celle de la série de polynômes d'Hermite, en raison de son temps de calcul nettement inférieur. Puis, nous avons calculé les trajectoires pour un potentiel coulombien, c'est-à-dire celui de l'atome d'hydrogène. Nous avons pu remarquer que d'avoir un incrément de temps très faible n'est pas nécessairement avantageux, car cela nécessite un temps de calcul très élevé en ayant des résultats similaires à un incrément de temps dix fois plus grand.

Dans le chapitre 5, nous avons calculé les trajectoires bohmiennes pour un oscillateur quartique, c'est-à-dire un oscillateur harmonique ayant une perturbation d'ordre 4. De plus, nous avons évalué l'impact de l'ajout de la correction de deuxième ordre de l'énergie sur les trajectoires bohmiennes. Nous avons également étudié la concordance entre la densité des trajectoires bohmiennes et la probabilité quantique.

Dans le chapitre 6, les possibilités physiques d'un système hors d'équilibre sont énumérées et brièvement décrites. Ainsi, dans une physique quantique hors d'équilibre, des signaux instantanés pourraient être envoyés, et des ordinateurs quantiques verraient leur rapidité drastiquement augmentée. De plus, le temps de dilatation nécessaire afin de passer d'un tel état à un système dicté par la probabilité quantique standard pourrait nous permettre de vérifier expérimentalement la mécanique bohmienne.

Quoi qu'il en soit, la mécanique bohmienne nous permet de visualiser la mécanique quantique d'une façon beaucoup plus intuitive, plus près de notre expérience quotidienne. Reste à voir comment elle sera façonnée dans les années futures afin d'en comprendre toute la portée.

Bibliographie

- [1] H. P. Stapp, *American Journal of Physics* 40 : 1098–1116 (1972)
- [2] J. Cramer, *Reviews of Modern Physics* 58 : 647–688, (1986)
- [3] E. Schrödinger, *Naturwissenschaften* 23 : 844–849 (1935)
- [4] A. Einstein, B. Podolsky, et N. Rosen, *Physical Review* 45 : 777–780 (1935)
- [5] J. S. Bell, *Physics* 1 : 195–200 (1964)
- [6] A. Aspect, P. Grangier, et G. Roger, *Physical Review Letters* 47 : 460–463 (1981)
- [7] A. Aspect, P. Grangier, et G. Roger, *Physical Review Letters* 49 : 91–94 (1982)
- [8] A. Aspect, P. Grangier, et G. Roger, *Physical Review Letters* 49 : 1804–1807 (1982)
- [9] *The information philosopher*, “John Bell Inequality Video”, [En ligne],
[http ://www.informationphilosopher.com/solutions/scientists/bell/inequality_](http://www.informationphilosopher.com/solutions/scientists/bell/inequality_video)
[video](http://www.informationphilosopher.com/solutions/scientists/bell/inequality_video) (2015)
- [10] D. Bohm, *Physical Review* 85 : 166–193 (1952)
- [11] J. S. Lundeen, B. Sutherland, A. Patel, C. Stewart et C. Bamber, *Nature* 474 :
188-191 (2011)
- [12] E. Abraham, S. Colin et A. Valentini, *Journal of Physics A : Mathematical and*
Theoretical 47 : 395306 (2014)
- [13] L. de Broglie, *Journal de Physique* 8 : 225–241 (1927)
- [14] D. Bohm et B. J. Hiley, *The Undivided Universe*, Routledge, Londres (1993)
- [15] P. R. Holland, *The Quantum Theory of Motion*, Cambridge University Press,
Cambridge (1993)

- [16] A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki et H. Ezawa, *American Journal of Physics* 57 : 117–120 (1989)
- [17] R. Feynman, R. Leighton, et M. Sands., *The Feynman Lectures on Physics*, Addison-Wesley Publishing Compagny, New York (1966)
- [18] Y. Aharonov et D. Bohm, *Physical Review* 115 : 485–491 (1959)
- [19] M. Peshkin et A. Tonomura, *The Aharonov-Bohm Effect*, Springer-Verlag, Berlin (1989)
- [20] C. Dewdney et B. J. Hiley, *Foundation of Physics* 12 : 27–48 (1982)
- [21] S. Colin et A. Valentini, *Proceedings of the Royal Society A* 470 : 20140288 (2014)
- [22] N. Temme, *Special Functions : An Introduction to the Classical Functions of Mathematical Physics*, Wiley, New York (1996)
- [23] L. Marchildon, *Mécanique quantique*, De Boeck Université, Bruxelles (2000)
- [24] D. Dürr, S. Goldstein et N. Zanghi, *Journal of Statistical Physics* 67 : 843–907 (1992)
- [25] A. Valentini et H. Westman, *Proceedings of the Royal Society of London A* 461 : 187–193 (2005)
- [26] A. Valentini, *Pramana Journal of Physics* 59 : 269–277 (2002)