

Une équation quantique irréversible

JEAN SALMON

Fondation Louis de Broglie, 23 quai de Conti, 75006 Paris

RÉSUMÉ. Une équation quantique irréversible est proposée. Elle diffère de l'équation de Schroedinger par l'introduction d'un terme de relaxation et d'un terme d'échange. Elle permet la description fine d'une transition.

ABSTRACT. A quantum irreversible equation is proposed. It differs from the Schroedinger's equation by the introduction of a relaxation term and an exchange term. It permits the fine description of the transition.

1 Introduction

Il est bien connu que l'équation de Schroedinger ne permet pas la description fine d'une transition quantique. Elle donne certes les niveaux d'énergie et dans un certain cadre elle assure le calcul des probabilités de transition entre deux états ainsi que la vie moyenne associée.

L'équation de Schroedinger est une équation quantique réversible. Aussi peut-on espérer en la complétant par des termes irréversibles obtenir des aspects nouveaux.

Considérons par exemple la transition d'un électron entre deux niveaux d'énergie E_1 et E_2 . Désignons par \hbar la constante de Planck divisé par 2π et par ω la pulsation associée à la transition. On a :

$$E_2 - E_1 = \hbar\omega$$

La fonction d'onde est désignée par Ψ et au moyen d'une théorie semi-quantique du rayonnement, on peut en déduire une vie moyenne τ caractéristique de la transition.

Nous allons ajouter à l'équation de Schroedinger usuelle et réversible, un terme de relaxation contenant τ et un terme d'échange. La fonction d'onde solution de cette équation sera désignée par ψ_I et à l'aide de celle-ci nous obtiendrons une description fine de la transition. En particulier l'énergie E variera avec le temps t de E_2 à E_1 selon la formule :

$$E(t) = E_1 + (E_2 - E_1) e^{-\frac{t}{\tau}} \tag{2}$$

La fonction d'onde irréversible Ψ_I sera mise sous la forme :

$$\Psi_I = e^{-\frac{itE(t)}{\hbar}} [C_1(t)\psi_1 + C_2(t)\psi_2] \tag{3}$$

ψ_1 et ψ_2 désignant les fonctions propres usuelles attachées aux niveaux E_1 et E_2 . Les fonctions $C_1(t)$ et $C_2(t)$ seront déterminées à partir de la résolution de l'équation quantique irréversible.

Nous allons maintenant reprendre l'équation de Schroedinger usuelle et réversible pour définir quelques quantités.

2 Notations – équation de Schrödinger

La notation t désigne le temps, \vec{r} le vecteur position, ϵ_0 la permittivité du vide, m_e la masse de l'électron et $-e$ sa charge. La transition considérée est celle d'un électron dans l'atome d'hydrogène. La masse du proton est m_p et on définit m_0 par :

$$m_0 = m_e \left(1 + \frac{m_e}{m_p} \right)^{-1}$$

Le potentiel d'interaction est $V_{(r)}$ avec

$$V_{(r)} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Désignons par \hat{H}_0 l'opérateur Hamiltonien

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{6}$$

L'équation de Schroedinger s'écrit :

$$i\hbar \frac{\delta \Psi}{\delta t} = \hat{H}_0 \Psi \quad (7)$$

Elle est réversible.

Aux états d'énergie E_1 et E_2 sont associées les fonctions propres ψ_1 et ψ_2 de l'opérateur \hat{H}_0 .

$$\hat{H}_0 \psi_1 = E_1 \psi_1 \quad (8)$$

$$\hat{H}_0 \psi_2 = E_2 \psi_2 \quad (9)$$

Les fonctions Ψ correspondantes sont Ψ_1 et Ψ_2 avec

$$E = E_1 \quad \Psi = \Psi_1 = e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \psi_1 \quad (10)$$

$$E = E_2 \quad \Psi = \Psi_2 = e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \psi_2 \quad (11)$$

Ψ_1 et Ψ_2 sont normées à l'unité et orthogonales.

$$\int \Psi_1^+ \Psi_1 d^3 r = 1 \quad (12)$$

$$\int \Psi_2^+ \Psi_2 d^3 r = 1 \quad (12 \text{ bis})$$

$$\int \Psi_1^+ \Psi_2 d^3 r = 0 \quad (13)$$

Le moment dipolaire associé à la transition est \vec{d} avec

$$\vec{d} = -e\vec{l} \quad (14)$$

$$\vec{l} = \int \psi_1^+ \vec{r} \psi_2 d^3 r \quad (15)$$

La vie moyenne est τ avec

$$\tau = \frac{3\pi\beta\epsilon_0\hbar c^3}{e^2\omega^3 l^2} \quad (16)$$

β désignant un coefficient proche de deux.

3 Nécessité d'une équation quantique irréversible

L'équation de Schroedinger ne permet pas la description fine de la transition quantique entraînant l'émission spontanée d'un photon. Il est donc nécessaire de compléter l'équation de Schroedinger en la rendant irréversible comme l'est en fait la transition.

Nous allons maintenant examiner trois équations quantiques irréversibles. La première est due à Louis De Broglie et à ses collaborateurs, la seconde est due à Crisp et Jaynes et la troisième est celle que nous proposons.

4 Equation irréversible de Louis de Broglie et de ses collaborateurs

Une première publication [2] est consacrée à la stabilité et aux cycles limites en dynamique irréversible ainsi qu'aux conditions de quantification. Une seconde publication [3] propose l'équation quantique non linéaire et irréversible suivante :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_I}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi_I + \alpha_1 F_0(\Psi_I \Psi_I^+) \Psi_I \frac{\partial}{\partial t} [\Psi_I \Psi_I^+] \quad (17)$$

F_0 désignant une fonction du produit $\Psi_I \Psi_I^*$ et α_1 une constante de couplage. Cette équation possède l'importante propriété de satisfaire à l'équation de conservation

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (18)$$

avec

$$\rho = \Psi_I \Psi_I^* \quad (19)$$

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m_0} [\Psi_I^* \vec{\nabla} \Psi_I - \Psi_I \vec{\nabla} \Psi_I^*] \quad (20)$$

Considérons un état propre Ψ_n avec

$$\Psi_n = A_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_n \quad (21)$$

Introduisons une perturbation Ψ_I s'écarte de Ψ_n On posera :

$$\Psi_I = e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} [A_n \psi_n + v] \quad (22)$$

Reportons dans (17) et linéarisons. Il vient

$$i\hbar \frac{\partial v}{\partial t} + (\hat{H}_0 - E_n)v + \alpha_1 A_n^2 \psi_n F_0(A_n^2 \psi_n \psi_n^*) (\psi_n^* \frac{\partial v}{\partial t} + \psi_n \frac{\partial v^*}{\partial t}) = 0 \quad (23)$$

On pourra chercher des solutions du genre :

$$v = \sum_p (X_p + iY_p) e^{\lambda t} \psi_p(\vec{r}) \quad (24)$$

En reportant dans (23) on obtiendra des équations dont on extraira un déterminant dont l'annulation donnera les quantités λ . . On lira également avec intérêt [4] .

5 Méthode de Crisp et Jaynes

Nous pouvons tenter de décrire une transition quantique en choisissant une expression de la fonction d'onde du genre :

$$\Psi(t, \vec{r}) = C_1(t) e^{i\omega_1 t} \psi_1 + C_2(t) e^{i\omega_2 t} \psi_2 \quad (25)$$

avec

$$\omega_1 = \frac{E_1}{\hbar} \quad (26)$$

$$\omega_2 = \frac{E_2}{\hbar} \quad (27)$$

C_1 et C_2 étant des fonctions complexes du temps t . Malheureusement si on utilise l'équation de Schroedinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi \quad (28)$$

on trouve, soit $C_2 = 0$ $C_1 = 1$ soit $C_2 = 1$ $C_1 = 0$ L'expression (25) ne convient pas. Aussi Crisp et Jaynes [5] proposent de conserver l'expression (25) mais en introduisant dans l'équation de Schroedinger un potentiel magnétique vecteur \vec{A} lié à la fonction d'onde. Désignons encore celle-ci par $\psi_I(t, \vec{r})$ et considérons la densité de courant électrique

$$\vec{j}_e = \frac{ie\hbar}{2m_0} [\Psi_I^* \vec{\nabla} \Psi_I - \Psi_I \vec{\nabla} \Psi_I^*] \quad (29)$$

et la densité de courant transverse \vec{j}_{te}

$$\vec{j}_{te} = \frac{2}{3} \vec{j}_e \quad (30)$$

Celle-ci produit un champ magnétique vecteur \vec{A} tel que

$$\vec{A} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int |\vec{r} - \vec{r}'|^{-1} \vec{j}_{te}(t - \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{c}) d^3r' \quad (31)$$

Celui-ci est introduit dans l'équation de Schroedinger d'où :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_I}{\partial t} = \frac{1}{2m_0} [-i\hbar \vec{\nabla} + e\vec{A}]^2 \Psi_I - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi_I \quad (32)$$

Les équations (29), (30), (31), (32) forment un système fermé si on adopte l'expression (25), il vient en supposant ψ_1 et ψ_2 réels.

$$\begin{aligned} \vec{j}_e &= \frac{ie\hbar}{2m_0} [\psi_2 \vec{\nabla} \psi_1 - \psi_1 \vec{\nabla} \psi_2] \\ &= [C_1 C_2^* e^{i\omega t} - C_2 C_1^* e^{-i\omega t}] \vec{j}_{12} \end{aligned} \quad (33)$$

avec

$$\vec{j}_{12} = \frac{ie\hbar}{2m_0} [\psi_2 \vec{\nabla} \psi_1 - \psi_1 \vec{\nabla} \psi_2] \quad (34)$$

Il faut alors entreprendre un long calcul complètement exposé dans (5) et (11) pour aboutir en posant

$$p_1 = C_1 C_1^+ \quad (35)$$

$$p_2 = C_2 C_2^+ \quad (36)$$

$$\alpha_2 = \frac{2e^2 l^2 \omega^3}{3\epsilon_0 \hbar c^3} \quad (37)$$

aux équations gouvernant les probabilités p_1 et p_2

$$\frac{dp_1}{dt} = \alpha_2 p_1 p_2 \quad (38)$$

$$\frac{dp_2}{dt} = -\alpha_2 p_1 p_2 \quad (39)$$

et aux solutions K désignant une constante

$$p_1 = \frac{K e^{\alpha_2 t}}{1 + K e^{\alpha_2 t}} \quad (40)$$

$$p_2 = \frac{K}{1 + K e^{\alpha_2 t}} \quad (41)$$

Elles satisfont à la condition :

$$p_1 + p_2 = 1 \quad (42)$$

et se comportent correctement à l'infini

$$t \rightarrow \infty \quad p_1 \rightarrow 1 \quad p_2 \rightarrow 0 \quad (43)$$

Malheureusement pour $t = 0$, le résultat est incorrect. On a

$$t = 0 \quad p_1 = \frac{K}{1 + K} \quad p_2 = \frac{1}{1 + K} \quad (44)$$

et non pas

$$p_1 = 0 \quad p_2 = 1 \quad (45)$$

Ce résultat est décevant. Pour obtenir un comportement correct à l'instant initial, il a été proposé de modifier la méthode de Crisp et Jaynes en ajoutant un nouvel opérateur dans l'équation de Schroedinger (J. Salmon [6] [7]). Cet opérateur est un opérateur d'échange. La notion d'échange est apparue en mécanique quantique dans les applications à la spectroscopie. On trouve deux intégrales dont l'une contient le facteur $\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)$ et l'autre $\psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)$ par convention d'échange. Ici on échangera ψ_1 et ψ_2 ou ce qui revient au même C_1 et C_2 dans $[C_1\psi_1 + C_2\psi_2]$ Désignons par \hat{H}_{12} cet opérateur tel que

$$\hat{H}_{12}\psi = \hat{H}_{12}[C_1\psi_1 + C_2\psi_2] = [C_1\psi_2 + C_2\psi_1] \quad (46)$$

L'opérateur d'échange \hat{H}_{EC} sera le produit de \hat{H}_{12} par le facteur $a\hbar\omega$ qui a la dimension d'une énergie. a désigne une constante de couplage sans dimension. On a :

$$\hat{H}_{EC} = a\hbar\omega \hat{H}_{12} \quad (47)$$

L'équation de Schroedinger ainsi modifiée devient

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_I}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [\vec{\nabla} + e\vec{A}]^2 \Psi_I - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi_I + \hat{H}_{EC} \Psi_I \quad (48)$$

Dans cette formule, le terme en A^2 est généralement assez petit pour être négligeable d'où

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_I}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi_I - \frac{e\hbar}{m_0} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \Psi_I + \hat{H}_{EC} \Psi_I \quad (49)$$

soit en utilisant la forme (25) qui entraîne des simplifications

$$\begin{aligned} i\hbar\left[\frac{dC_1}{dt}e^{i\omega_1 t} + \frac{dC_2}{dt}e^{i\omega_2 t}\right] = \\ -\frac{e\hbar}{m_0}\vec{\nabla}\cdot\vec{A}[C_1e^{i\omega_1 t}\psi_1 + C_2e^{i\omega_2 t}\psi_2] \\ + a\hbar\omega[C_2e^{i\omega_1 t}\psi_1 + C_1e^{i\omega_2 t}\psi_2] \end{aligned} \quad (50)$$

On aboutit ainsi au système :

$$\frac{dp_1}{dt} = [\alpha_2 p_1 p_2 + 2a\omega(p_1 p_2)^{1/2}] \quad (51)$$

$$\frac{dp_2}{dt} = -[\alpha_2 p_1 p_2 + 2a\omega(p_1 p_2)^{1/2}] \quad (52)$$

α_2 étant égal à $\frac{4\pi}{\tau}$ On choisit

$$a = \frac{\pi}{\omega\tau} \ll 1 \quad (53)$$

En effet, le produit $\omega\tau$ est très supérieur à l'unité et ce choix de a mène à un résultat simple et remarquable. En ajoutant (51) à (52), on obtient

$$\frac{d}{dt}(p_1 + p_2) = 0 \quad (54)$$

Et on satisfait ainsi à la condition

$$p_1 + p_2 = 1 \quad (55)$$

d'où l'équation différentielle

$$\frac{dp_1}{dt} = \frac{2\pi}{\tau}[2p_1(1-p_1) + (p_1(1-p_1))^{1/2}] \quad (56)$$

Posons

$$p_1 = \sin^2\phi_1 \quad (57)$$

Il vient

$$\frac{dt}{\tau} = \frac{1}{\pi}\left[\frac{d\phi_1}{1 + \sin 2\phi_1}\right] \quad (58)$$

soit

$$t = \frac{\tau}{\pi} \int_I^\phi \left[\frac{d\phi_1}{(1 + \sin 2\phi_1)}\right] \quad (59)$$

Le résultat final est

$$t = \frac{\tau}{\pi} \left[\frac{p_1^{1/2}}{p_1^{1/2} + (1-p_1)^{1/2}} \right] \quad (60)$$

soit encore

$$p_1 = \frac{(\pi \frac{t}{\tau})^2}{1 - 2\pi \frac{t}{\tau} + 2(\frac{\pi t}{\tau})^2} \quad (61)$$

On a bien

$$t = 0 \quad p_1 = 0 \quad (62)$$

$$t = \frac{\tau}{\pi} \quad p_1 = 1 \quad (63)$$

La transition s'arrête à $t = \frac{\tau}{\pi}$. La méthode de Crisp et Jaynes ainsi remaniée satisfait à la condition initiale. Il convient d'ajouter que cette méthode s'est malheureusement révélée inadaptée au calcul du décalage de Lamb ainsi qu'il est montré dans [8]. En ce qui concerne l'émission spontanée, il existe d'autres méthodes de calcul [9] [10]

6 Méthode de relaxation

Cette méthode nous a été inspirée par une analogie avec la thermodynamique. En effet, en théorie cinétique des gaz hors d'équilibre, on utilise avec efficacité des termes de relaxation. Nous allons brièvement en évoquer un.

6.1 - Relaxation dans un gaz neutre

Considérons un gaz neutre. Les molécules ont une masse m . t désigne le temps, \vec{r} le vecteur position d'une molécule et \vec{w} son vecteur vitesse. On suppose qu'une force extérieure \vec{X} dérivant d'un potentiel V_N agit sur les molécules. Désignons par $f(t, \vec{r}, \vec{w})$ la fonction de distribution des molécules. En dynamique Hamiltonienne c'est-à-dire en l'absence de viscosité, la fonction de distribution des molécules f est solution de l'équation cinétique

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{w} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{X}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{w}} = 0 \quad (64)$$

Cette équation est réversible. Elle n'est donc exacte qu'à l'équilibre. $\frac{\partial f}{\partial t}$ est alors nul et on obtient à la température T la solution satisfaisante

$$f = f_M = \left(\frac{m}{2\pi K_0 T}\right)^{3/2} e^{-\left[\frac{m\vec{w}^2}{2K_0 T} + \frac{V_N}{K_0 T}\right]} \quad (65)$$

Supposons maintenant le gaz écarté de l'équilibre avec T uniforme et constant et \vec{X} nul. Le phénomène de viscosité intervient et il faut une équation cinétique irréversible. Bathanagar, Gross et Krook proposent l'équation cinétique suivante dans laquelle ν désigne la fréquence de collision et f_M la fonction de distribution Maxwellienne de l'équilibre local. Ils obtiennent ainsi une expression satisfaisante du coefficient de viscosité.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{w} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{X}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{w}} = \nu(f_M - f) \quad (66)$$

6.2. - Une équation cinétique irréversible

Le second terme de (66) nous suggère d'introduire dans une équation quantique le terme irréversible suivant que nous désignons par $\hat{H}_I \psi_I$ et qui est de la forme

$$\hat{H}_I \Psi_I = \frac{t}{\tau}(E_1 - E)\Psi_I \quad (67)$$

Ce terme est un terme de relaxation de E vers E_1 avec la fréquence caractéristique $\frac{1}{\tau}$. Il est nul pour

$t = 0$ à cause du facteur $\frac{t}{\tau}$. Il est nul pour t infini car le produit $\frac{t}{\tau}(E_1 - E)$ sera nul pour $E = E_1$ à cause d'une variation exponentielle de $(E_1 - E)$. L'équation quantique devient irréversible et s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_I}{\partial t} = [\hat{H}_0 + \hat{H}_I] \Psi_I = \hat{H}_0 \Psi_I + \frac{t}{\tau} (E_1 - E) \Psi_I \quad (68)$$

Nous chercherons une solution du genre

$$\Psi_I = e^{-\frac{iE(t)}{\hbar}} [C_1(t)\psi_1 + C_2(t)\psi_2] \quad (69)$$

Malheureusement la méthode ne conduit pas pour C_1 et C_2 à des solutions satisfaisantes. Il en était de même avec la méthode de Crisp et Jaynes mais les résultats sont devenus corrects avec l'introduction d'un opérateur d'échange. Nous admettons que celui-ci peut intervenir dans le nuage de probabilité. Nous le désignons par \hat{H}'_{12} et nous lui attribuons la propriété suivante

$$\hat{H}'_{12}[C_1\psi_1 + C_2\psi_2] = -C_2\psi_1 + C_1\psi_2 \quad (70)$$

Affectons le d'un coefficient qui est le produit de $\hbar\omega$ par une fonction sans dimension de la forme $F(\frac{t}{\tau})$. Il devient H'_{EC} avec

$$H'_{EC}\Psi_I = \hbar\omega F(\frac{t}{\tau})\hat{H}'_{12}\Psi_I \quad (71)$$

L'équation quantique s'écrit maintenant

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_I}{\partial t} = [\hat{H}_0 + \hat{H}_I + \hat{H}'_{EC}] \Psi_I \quad (72)$$

Soit en utilisant l'expression (69) de Ψ_I

$$\begin{aligned} i\hbar \left[\frac{dC_1}{dt} \psi_1 + \frac{dC_2}{dt} \psi_2 \right] + [E(t) + t \frac{dE}{dt}] [C_1\psi_1 + C_2\psi_2] = \\ E_1 C_1 \psi_1 + E_2 C_2 \psi_2 \\ + \frac{t}{\tau} [E_1 - E(t)] [C_1\psi_1 \\ + \hbar\omega F(\frac{t}{\tau}) [C_1\psi_2 - C_2\psi_1] \end{aligned} \quad (73)$$

Cette équation est équivalente au système

$$t[C_1\psi_1 + C_2\psi_2] \left[\frac{dE}{dt} + \frac{(E_1 - E)}{\tau} \right] = 0 \quad (74)$$

$$\psi_1 \left[i\hbar \frac{dC_1}{dt} + (E - E_1)C_1 - \hbar\omega F(\frac{t}{\tau})C_2 \right] = 0 \quad (75)$$

$$\psi_2 \left[i\hbar \frac{dC_2}{dt} + (E - E_2)C_2 + \hbar\omega F(\frac{t}{\tau})C_1 \right] = 0 \quad (76)$$

L'équation (74) admet pour solution

$$E(t) = E_1 + (E_2 - E_1)e^{-\frac{t}{\tau}} = E_1 + \hbar\omega e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (77)$$

d'où

$$E - E_1 = \hbar\omega e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (78)$$

$$E - E_2 = E - E_1 + E_1 - E_2 = \hbar\omega(e^{-\frac{t}{\tau}} - 1) \quad (79)$$

Les équations (75) et (76) s'écrivent en enlevant ψ_1 et ψ_2 .

$$\frac{i}{\omega} \frac{dC_1}{dt} + e^{-\frac{t}{\tau}} C_1 - FC_2 = 0 \quad (80)$$

$$\frac{i}{\omega} \frac{dC_2}{dt} + (e^{-\frac{t}{\tau}} - 1)C_2 + FC_1 = 0 \quad (81)$$

Multiplions (80) par C_1 et (81) par C_2 et additionnons. Il vient

$$\frac{i}{w} [C_1 \frac{dC_1}{dt} + C_2 \frac{dC_2}{dt}] + e^{-\frac{t}{\tau}} [C_1^2 + C_2^2] - C_2^2 = 0 \quad (82)$$

Cette équation admet les solutions satisfaisantes

$$C_1 = (1 - e^{-\frac{t}{\tau}})^{1/2} \quad (83)$$

$$C_2 = (e^{-\frac{t}{\tau}})^{1/2} \quad (84)$$

On a en effet

$$C_1 C_1^+ + C_2 C_2^+ = 1 \quad C_1 \frac{dC_1}{dt} + C_2 \frac{dC_2}{dt} = 0 \quad (85)$$

ainsi que

$$t = 0 \quad C_1 = 0 \quad C_2 = 1 \quad (86)$$

$$t = \infty \quad C_1 = 1 \quad C_2 = 0 \quad (87)$$

Nous pouvons maintenant déterminer $F(\frac{t}{\tau})$. Multiplions (80) par C_1 et (81) par C_2 et soustrayons. On a

$$\frac{i}{\omega} [C_1 \frac{dC_1}{dt} - C_2 \frac{dC_2}{dt}] + e^{-\frac{t}{\tau}} [C_1^2 - C_2^2] + C_2^2 - 2FC_1 C_2 = 0 \quad (88)$$

Utilisons pour C_1 et C_2 les expressions (83) et (84). Il vient

$$\frac{i}{\omega\tau} e^{-\frac{t}{\tau}} + 2e^{-\frac{t}{\tau}} (1 - e^{-\frac{t}{\tau}}) - 2F(\frac{t}{\tau}) [e^{-\frac{t}{\tau}} (1 - e^{-\frac{t}{\tau}})] = 0 \quad (89)$$

d'où l'expression de $F(\frac{t}{\tau})$

$$F(\frac{t}{\tau}) = \frac{e^{-\frac{t}{\tau}} (1 - e^{-\frac{t}{\tau}}) + \frac{i}{2\omega\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}}{[e^{-\frac{t}{\tau}} (1 - e^{-\frac{t}{\tau}})]^{1/2}} \quad (90)$$

L'équation quantique irréversible s'écrit finalement

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi_I}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \Psi_I - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi_I + \frac{t}{\tau} (E_1 - E) \Psi_I \\ + \hbar\omega \left[\frac{e^{-\frac{t}{\tau}} (1 - e^{-\frac{t}{\tau}}) + \frac{i}{2\omega\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}}{[e^{-\frac{t}{\tau}} (1 - e^{-\frac{t}{\tau}})]^{1/2}} \right] \hat{H}'_{12} \Psi_I \end{aligned} \quad (91)$$

Elle admet la solution

$$\begin{aligned} \Psi_I = [e^{-i\frac{t}{\hbar} E_1 + (E_2 - E_1) e^{-\frac{t}{\tau}}} \\ \times [(1 - e^{-\frac{t}{\tau}})^{1/2} \psi_1 + (e^{-\frac{t}{\tau}})^{1/2} \psi_2] \end{aligned} \quad (92)$$

puisque

$$C_1 = (1 - e^{-\frac{t}{\tau}})^{1/2} \quad (93)$$

$$C_2 = (e^{-\frac{t}{\tau}})^{1/2} \quad (94)$$

La fonction ψ_I est normée

$$\int \Psi_I^\dagger \Psi_I d^3r = \int [C_1 \psi_I + C_2 \psi_2]^2 d^3r = 1 \quad (95)$$

Elle évolue de $e^{-i\omega_2 t} \psi_2$ à $e^{-i\omega_1 t} \psi_1$ de manière continue ainsi que l'énergie qui va de E_2 à E_1 selon la formule

$$E(t) = E_1 + (E_2 - E_1) e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (96)$$

Conclusion :

Cette nouvelle équation quantique est une équation de Schroedinger rendue irréversible par l'addition d'un terme de relaxation en $\frac{t}{\tau}$ et d'un terme d'échange. Elle permet une description fine de la transition. Certes il semble qu'elle ne soit adaptée qu'à ce phénomène. Est-il possible de penser que pour une autre classe de phénomènes pour lesquels l'équation de Schroedinger apporte un temps caractéristique τ_c il existe la possibilité d'ajouter des termes irréversibles convenables pour aboutir à des résultats nouveaux ? En théorie cinétique des gaz et des plasmas, il existe

non pas une mais des équations irréversibles adaptées à des classes de phénomène (Boltzmann, Bathana-gar et diverses équations du genre Fokker-Planck). L'irréversibilité entraîne la diversité

Références

- [1] E. Durand, Mécanique quantique T1 p. 613 (1970)
- [2] J. Andrade e Silva, F. Fer, P. Leruste, G. Lochak, Cah. Phys. T15 p. 210 (1961)
- [3] J. Andrade e Silva, F. Fer, P. Leruste, G. Lochak, Cah. Phys. T 137 p.1 (1961)
- [4] D. Fargue, S. Diner et al. The wave particle dualism D. Reidel publishing Company (1984)
- [5] M. Crisp, E. Jaynes, Phys. Rev. T 179 p. 253 (1969)
- [6] J. Salmon, Ann. Fondation Louis de Broglie, Vol. 15 n° 3 p. 359 1990)
- [7] J. Salmon, Ann. Fondation Louis de Broglie, Vol. 18 n° 2 p. 181 (1993)
- [8] B. Blaive, R. Boudet, Ann. Fondation Louis de Broglie, Vol. 14 N° 2 p. 147 (1989)
- [9] R. Boudet, Found. of physics, Vol. 23 n° 10 p. 1387 (1993)
- [10] A.O Barut, Y. Salamin, Phys. Rev. A n° 37 p. 2284 (1988)
- [11] P.L. Balhanagar, E.P. Gross, M. Krook, Phys. Rev. 94 p. 511 (1954)

(Manuscrit reçu le 1er octobre 1998)