

Le vide quantique et ses fluctuations

Frédéric Élie avril 2021

Copyright France.com

La reproduction des articles, images ou graphiques de ce site, pour usage collectif, y compris dans le cadre des études scolaires et supérieures, est INTERDITE. Seuls sont autorisés les extraits, pour exemple ou illustration, à la seule condition de mentionner clairement l'auteur et la référence de l'article.

« Si vous de dites rien à votre brouillon, votre brouillon ne vous dira rien ! » Jacques Breuneval, mathématicien, professeur à l'université Aix-Marseille I, 1980

Abstract :

La conception du vide, en mécanique quantique, est très différente de celle de la physique classique : elle met en œuvre l'énergie du « point zéro », état quantique fondamental correspondant à l'absence de quanta, et comme conséquence du principe d'incertitude de Heisenberg qui est un des fondements du formalisme quantique, le concept de particules virtuelles. Les conséquences de l'existence du vide quantique, s'il venait à faire l'objet d'expériences cruciales prouvant définitivement sa réalité, sont multiples, de l'échelle nanophysique jusqu'aux échelles cosmologiques puisque, dans le Modèle Standard cosmologique, l'énergie du vide serait associée à la constante cosmologique. Les principaux effets qui sont considérés comme manifestation du vide quantique sont l'effet Casimir, le décalage de Lamb, et d'autres effets. Le rayonnement des trous noirs, établi par Stephen Hawking, impliquerait aussi le rôle du vide quantique... Dans le présent document il n'est pas possible d'évoquer toute la richesse des études sur le sujet. Il se donne comme objet de présenter quelques outils techniques qui interviennent dans la théorie : opérateurs de création et d'annihilation, perturbations de l'hamiltonien des champs, diagrammes et intégrales de chemin de Feynman, états virtuels ; auparavant une présentation succincte du concept de vide quantique et de ses effets est donnée dans les chapitres introductifs.

SOMMAIRE

1 - Le vide quantique

- 1.1 L'énergie du point zéro
- 1.2 Particules virtuelles
- 1.3 Problème de l'énergie totale du vide quantique
- 2 Fluctuations du vide quantique
- 2.1 Effets du vide quantique en tant que fluctuations du champ électromagnétique
- 2.2 Décalage de Lamb
- 2.3 Rayonnement de Hawking ou évaporation des trous noirs
- 3 Effet Casimir
- 3.1 Force attractive entre deux plaques parallèles parfaitement conductrices, placées dans le vide
- 3.2 La force de Casimir est-elle obligatoirement due aux fluctuations du vide quantique ?
- 4 Opérateurs de création et d'annihilation, perturbations de l'hamiltonien du champ
- 4.1 Pour expliquer l'état du point zéro (et les fluctuations associées)
- 4.2 Perturbations de l'hamiltonien
- 4.3 Diagrammes de Feynman et états virtuels
- 4.4 Opérateurs de création et d'annihilation

5 – Lagrangien du champ et quantification

- 5.1 Champ classique
- 5.2 Couplage d'un champ classique avec un système de particules
- 5.3 Champs spinoriels de Dirac

Annexe 1 : Démonstration de (5.40 bis) et (5.41 a,b bis)

Annexe 2 : Inégalités, ou relations d'incertitude, de Heisenberg

- A2.1 Relations d'incertitude pour l'oscillateur harmonique
- A2.2 Relations d'incertitude de Heisenberg dans le cas général
- A2.3 Relation d'incertitude temps-énergie

Annexe 3 : Intégrales de chemin de Feynman

- A3.1 Généralités
- A3.2 Représentations de Schrödinger et de Heisenberg
- A3.3 Description de l'évolution des états quantiques par les intégrales de chemin de Feynman

<u>Références</u>

1.1 – L'énergie du point zéro

Le vide quantique regroupe les états fondamentaux des champs d'interaction en l'absence de particules de matière (fermions). Dans le modèle standard des interactions il s'agit des champs : électromagnétique, électrofaible (bosons de Higgs), de jauge et de fermions.

Les champs sont des superpositions de modes d'oscillation, de différentes pulsations $\omega = 2\pi v$ (v est la fréquence), sur des niveaux quantifiés n ω , où n est un entier. On montre que les différents modes peuvent être assimilés à ceux d'oscillateurs harmoniques et que, en appliquant les principes de la mécanique quantique (notamment la non commutation des opérateurs impulsion **p** et position **x**, à l'origine des inégalités de Heisenberg), leurs énergies sont, pour chaque pulsation :

$$E_n = \hbar \omega \left(\frac{1}{2} + n\right) \quad (1.1)$$

L'état fondamental, pour chaque mode du champ, correspond à n = 0 ; son énergie, appelée énergie du point zéro, n'est pas nulle mais égale à $E_0 = 1/2.\hbar\omega$ (avec $\hbar = h/2\pi$, h = 6,62606876.10⁻³⁴ J.s constante de Planck). Le vide quantique contient donc de l'énergie, et même, a priori, beaucoup d'énergie puisque les pulsations ne sont pas supérieurement bornées. Mais cette énergie n'est pas utilisable pour diverses raisons :

- Pour chaque oscillateur au niveau fondamental, cette énergie est la plus petite possible : son extraction demande alors une énergie extérieure qui lui est au moins égale.

- Par suite des inégalités de Heisenberg (ou principe d'incertitude), elle subit des fluctuations par lesquelles peuvent émerger puis disparaître des particules virtuelles. L'apport d'une énergie extérieure en vue d'une utilisation de l'énergie du vide agirait sur ces fluctuations, dans le sens d'une augmentation de l'instabilité, et pour retrouver son état d'équilibre stable le vide retournerait vers un nouvel état de point zéro.

- Aux échelles étendues, sur des grands volumes d'espace, les énergies des fluctuations du vide autour du point zéro (et non les énergies du point zéro qui constituent le vide quantique) deviennent négligeables. En effet, par exemple en électrodynamique quantique, on montre que l'énergie moyenne du point zéro correspondant à un oscillateur du champ électromagnétique dépend du volume V dans lequel il est confiné selon :

$$E^2 = \frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 V} \quad (1.2)$$

 $(\epsilon_0 = 8,854187817...$ F.m⁻¹ permittivité du vide). La relation (1.2) signifie qu'aux échelles macroscopiques l'énergie moyenne est négligeable puisque sur de grandes échelles les fluctuations s'annulent mutuellement.

Cependant l'énergie moyenne des fluctuations du vide quantique entraîne des effets à l'échelle microphysique observables, comme :

- L'effet Casimir, qui sera décrit succinctement plus loin (chapitre 3);

- Des photons émis spontanément par des atomes ;

- Échange de particules virtuelles, non directement observables, qui empruntent de l'énergie au vide, et sont vecteurs des interactions entre les particules élémentaires, qui sont, elles, observables ; ce sont par exemple les photons virtuels échangés entre deux particules chargées lors de leur interaction électromagnétique. Suite aux relations d'incertitude, l'énergie n'est pas conservée sur un laps de temps très court, en revanche elle l'est au bout d'un temps fini parce que les particules virtuelles disparaissent en restituant l'énergie.

- L'apparition de paires particules-antiparticules virtuelles, par exemple électrons-positrons, résultant de la conservation de la charge ; tandis que l'énergie peut ne pas se conserver sur une durée très courte qui correspond à une incertitude d'autant plus grande sur l'énergie, la charge électrique, en revanche se conserve toujours (car elle n'est pas impactée par les relations d'incertitude). L'apparition de paires de particules possédant une masse au repos s'explique par l'équivalence relativiste masse-énergie E = mc², d'où il résulte qu'une fluctuation d'énergie du vide produise une fluctuation de masse, sujette à apparaître et à disparaître sur un temps très court.

- Des oscillations moléculaires contribuant aux forces de Van der Waals...

De sorte qu'à la température T = 0 K, où pour la thermodynamique statistique classique les particules sont supposées ne plus se déplacer, pour la thermodynamique statistique quantique, en revanche, un minimum d'agitation subsiste à cause de l'énergie du point zéro et de ses fluctuations. Par exemple, sous 1 atmosphère et à T = 0 K, l'hélium liquide ne gèle pas à cause des fluctuations de son énergie du point zéro.

Remarque : dégénérescence des modes propres des oscillateurs :

La relation (1.1), établie pour une seule dimension d'espace, est modifiée comme suit pour les 3 dimensions d'espace :

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{3}{2} \right) \quad (1.3)$$

où un même mode propre n correspond directement aux trois modes suivant chaque dimension :

$$n = n_x + n_y + n_z$$
 (1.4)

On dit qu'il y a dégénérescence des valeurs propres de l'opérateur hamiltonien de l'oscillateur : plusieurs configurations spatiales, contraintes par (1.4), c'est-à-dire plusieurs états (ou vecteurs) propres de l'opérateur, correspondent à la même valeur propre de l'opérateur : elles ont même énergie propre. On montre que, pour un niveau d'énergie n donné, il existe gn états propres différents, ou degré de dégénérescence :

$$g_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$
 (1.5)

1.2 – Particules virtuelles

■ Échange de particules virtuelles lors d'interactions : Lorsque deux particules sont en interaction leur hamiltonien H est la somme d'un hamiltonien H₀ correspondant à leur état libre et d'un hamiltonien H' de perturbation ; tandis que, en général, on sait déterminer les états propres de H₀, les états propres de H ne sont pas connaissables de manière exacte, mais seulement selon la procédure dite de perturbations utilisée en électrodynamique quantique (QED) et en chromodynamique quantique (QCD). Dans cette théorie, H' est supposé très faible devant H₀, et l'on a (référence [14]) :

$$H = H_0 + H' < a | H' | b > << < a | H_0 | b >$$
(1.6)

Soient, par exemple, deux électrons, initialement suffisamment éloignés pour être considérés libres (hamiltonien H_0). En se rapprochant, ils entrent en « collision », c'est-à-dire interagissent par leur champ électromagnétique : cette interaction se traduit par l'émission d'un photon par l'électron n°1, et par son absorption par l'électron n°2, le photon étant le boson de jauge de l'interaction électromagnétique ; elle est représentée par le diagramme de Feynman, figure 1.1 :



figure 1.1 : diffusion de deux électrons par échange d'un photon



figure 1.2 : représentation corrigée du processus de diffusion des électrons par échange de photon

On montre que l'échange représenté en figure 1.1 apporte une amplitude de probabilité dans les états

des électrons proportionnelle à la constante de structure fine

 $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = 1/137,03599976...$ En

réalité les deux électrons, après avoir interagi une première fois par échange de photon, interagissent de nouveau, comme le représente la figure 1.2, avec une contribution à l'amplitude de probabilité par un facteur cette fois égal à α^2 , et plus généralement α^n pour n interactions successives ; de sorte que l'amplitude de probabilité des états est une série dont les termes α^n sont d'autant plus petits que le nombre d'interactions n est élevé : les interactions d'ordre supérieur sont donc très peu probables.

Plus généralement, selon les interactions entre particules, les bosons intermédiaires échangés sont différents : tandis qu'il s'agit des photons pour l'interaction électromagnétique, comme on vient de le voir, pour l'interaction électrofaible (électrodynamique quantique QED) entre les leptons (exemple : électrons) et les quarks (constitutifs de nucléons) les bosons échangés sont W et Z₀, et pour l'interaction nucléaire forte (chromodynamique quantique QCD) entre les quarks les bosons échangés sont les gluons.

Sans les relations d'incertitude de Heisenberg, le bilan d'énergie de l'échange de bosons dans la paire de particules serait rigoureusement nul : l'énergie de la particule 1 serait diminuée de celle empruntée par le boson émis et restituée à la particule 2 qui l'absorbe. Or les relations d'incertitude, qui s'écrivent par exemple pour le temps et l'énergie :

$$\Delta E \Delta t \ge \frac{\hbar}{2} \quad (1.7)$$

énoncent que l'on ne peut avoir simultanément une précision infinie sur l'énergie et le temps : une incertitude ΔE sur l'énergie entraîne une incertitude Δt sur le temps inversement proportionnelle, et vice versa. Une démonstration est proposée en <u>annexe 2</u>. Il faut bien comprendre ici que ces incertitudes ainsi reliées ne sont pas causées par un degré d'ignorance statistique des détails d'une évolution d'un système quantique, que des techniques plus élaborées permettraient de dépasser ; ces incertitudes ont un caractère ontologique : elles sont inhérentes à la nature quantique des phénomènes, c'est-à-dire à des échelles et/ou pour des relations où les états des systèmes se comprennent comme des superpositions de possibilités affectées d'amplitudes de probabilité a priori de se réaliser. Elles ne sont pas améliorables par la connaissance de « paramètres cachés », dont l'existence satisferait les critères des inégalités de Bell ; celles-ci sont violées, comme l'ont montré les expériences d'Alain Aspect et suivantes ([15], [16], [17], [2]).

Suite aux relations d'incertitudes, la conservation de l'énergie est valable à ces incertitudes près : sous certaines conditions l'incertitude sur l'énergie contient, ou est égale à, l'énergie suffisante pour la création de particules. Celles-ci sont alors dites « virtuelles ». Sans cette incertitude, la relation d'énergie-impulsion d'Einstein appliquée à la paire de particules en interaction

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (1.8)$$

ne le permettrait pas (**p** : quantité de mouvement, et m masse propre de la particule). Dans l'exemple simplifié de l'interaction de deux électrons par échange d'un photon, figure 1.1, si l'incertitude de l'énergie du photon est suffisante, elle peut produire une paire de particules virtuelles, électron-positron,

ayant chacune une masse $m \approx \frac{\Delta E}{2c^2}$. Il s'agit obligatoirement d'une paire de particules et non d'une

seule particule, à cause de la conservation de la charge lors des fluctuations du vide quantique, comme énoncé plus haut : le photon étant sans charge, le bilan de charge des particules virtuelles reste nul, d'où le positron (charge e⁺) et l'électron (charge e⁻), qui sont antiparticule l'une de l'autre. La masse, ou l'énergie, des électrons virtuels produits dépend de la durée caractéristique de l'interaction t, en effet :

$$\Delta E = 2mc^2 \ge \frac{\hbar}{2t} \quad (1.9)$$

La paire électron-positron serait produite si la durée caractéristique de la collision, t, est suffisamment brève pour correspondre à la masse de deux électrons (masse d'un électron $m_e = 9,109389.10^{-31}$ kg), puisque les antiparticules ont toujours même masse. Au-delà ce cette durée les particules virtuelles disparaissent. Le processus est représenté à la figure 1.3 :



figure 1.3 : création d'une paire électron-positron virtuels lors de la collision de deux électrons

La durée caractéristique maximale t requise pour la création de paire électron-positron, d'après (1.9) est t = 6.10^{-22} s. La distinction entre une particule réelle et une particule virtuelle réside dans leur durée caractéristique : si une particule existe sur une durée très grande par rapport à celle de son interaction avec d'autres particules, alors l'incertitude globale sur le temps est très grande et donc, d'après (1.7), l'incertitude sur son énergie est quasi nulle : la précision sur son énergie est très grande ; dans ce cas, la particule est considérée comme réelle. À l'inverse, si la durée caractéristique de la particule est de l'ordre de celle de l'interaction, l'incertitude sur son énergie est grande : la particule est considérée comme virtuelle. On voit bien ici le caractère quelque peu arbitraire de la distinction entre une particule réelle et une particule virtuelle. Mais les conséquences théoriques ne sont pas neutres : l'apparition et la disparition incessante et stochastique de particules virtuelles dans le vide quantique, en tant qu'état fondamental ou point zéro, entraînent la divergence des intégrales qui interviennent dans le calcul des amplitudes de probabilité. C'est le problème des infinis dans les théories des perturbations utilisant des décompositions du type (1.6), et sa méthode de résolution est appelée « renormalisation ». Celle-ci consiste à définir les constantes de couplage associées aux interactions de manière à supprimer ces divergences, ce qui, techniquement, revient à introduire l'échelle du processus d'interaction dans ces définitions, et ainsi les « constantes » de couplage ne sont plus... constantes. Pour qu'une théorie des champs soit renormalisable, il faut et il suffit que les divergences qui affectent les diagrammes de Feynman représentant les suites d'interaction des particules puissent être traduites à l'intérieur même des propriétés intrinsèques des particules telles que leur masse, constante de couplage, etc.

Les théories de jauge dont nous avons parlé entrent dans ce critère : QED (interaction des particules chargées, boson de jauge : photon, toutefois moins concernée par la renormalisation du fait de la convergence évoquée plus haut), QCD (interaction entre quarks, boson de jauge : gluon), électrofaible (groupes de symétrie SU(2)xU(1), bosons de jauge : Z et W), nucléaire forte (interaction entre nucléons, boson de jauge : méson π ou pion, dont la masse m et la portée d'interaction r₀ sont reliées par la formule de Yukawa : mc² = $\hbar c/r_0$ = 100 MeV; cette théorie est devenue une conséquence de la QCD) (figure 1.4) (voir [18], [14]).



figure 1.4 : exemples d'interactions relevant de la théorie des champs de jauge renormalisables :

- interaction électromagnétique entre 2 électrons avec échange de photon virtuel
- interaction nucléaire faible entre un neutron et un anti-neutrino avec échange du boson virtuel W-, donnant un proton et un électron (conversion d'un neutron en proton)
- interaction nucléaire forte entre un quark « vert » et un quark « bleu » avec échange d'un gluon virtuel, donnant 2 quarks échangeant leur couleur
- interaction nucléaire entre un proton et un neutron avec échange d'un méson pi virtuel, donnant un échange du porteur de charge.

On observe, indirectement, la création et la disparition des particules virtuelles lors des interactions dans les accélérateurs de particules, comme par exemple des gerbes de particules lors des collisions d'électrons, plus massives que les électrons, sur des durées très courtes. Si, dans un atome, un électron passe d'un niveau d'énergie de nombre quantique n à un niveau d'énergie supérieure de nombre quantique n' > n, il se trouve dans un état moins stable que l'état initial. Il tend alors à retrouver l'état stable en émettant un photon d'énergie égale à la différence des niveaux : $E = (n'-n)\hbar\omega$; mais cette transition est sous l'hypothèse d'une durée infinie à laquelle correspond, par les incertitudes de Heisenberg, une précision infinie sur l'énergie. Si la durée de présence de l'électron au niveau n' est très courte, c'est-à-dire si son état est très instable, alors l'incertitude sur l'énergie sera d'autant plus grande et sera accompagnée de photons virtuels, d'énergie plus grande que E, dont l'existence se traduit par l'élargissement des raies spectrales ; l'énergie sera au moins égale à $\hbar/2t$, et l'élargissement des raies au moins égal à $\Delta n \ge 1/(2\omega t)$, où t est la durée du processus.

Remarque : portée des interactions fondamentales et bosons intermédiaires :

Sans utiliser le formalisme de la théorie quantique des champs (ou « seconde quantification » [2]), on peut évaluer la forme des interactions en tant qu'échanges de bosons intermédiaires (¹), par exemple pour l'interaction électromagnétique et retrouver la forme du champ en 1/r² :

Deux électrons distants de r sont en interaction électromagnétique par échange de photons virtuels. La variation d'énergie que cet échange produit se traduit par la force électrostatique. Soit E l'énergie du photon échangé entre les deux électrons : comme le photon virtuel parcourt la distance r en une durée égale à t = r/c, son énergie est de l'ordre de grandeur donné par les inégalités de Heisenberg : E $\approx \hbar/t$, soit E = $\hbar c/r$. Cette énergie du photon entraîne une variation d'énergie du couple d'électrons égale à l'énergie d'interaction ; en première approximation elle est proportionnelle à E : $E_{elec} \approx bE$, où b est la constante de proportionnalité, et l'on a :

$$E_{elec} \approx b \frac{\hbar c}{r}$$
 (1.10)

La force d'interaction est le gradient de cette énergie que l'on assimile à l'énergie potentielle électrostatique :

$$F(r) = -\frac{\partial E_{elec}}{\partial r} = b \frac{\hbar c}{r^2} \quad (1.11)$$

qui est la force de Coulomb pourvu que l'on ait :

$$b = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c} = \alpha \quad (1.12)$$

où α est la constante de structure fine. Avec (1.11) on obtient bien un comportement en 1/r², mais pour les bosons intermédiaires il n'est pas une conséquence du nombre de dimensions de l'espace où ils se propagent. Il n'a pas été besoin, ici, d'exprimer que dans un espace de dimension 3 le flux de la force électrostatique à travers une sphère de rayon r se conserve, d'où la loi en 1/r² en 3D obtenue en électrostatique classique.

Pour l'interaction électromagnétique, le boson intermédiaire, le photon, est une particule dont la masse propre (masse dans le référentiel de repos) est nulle. Mais lorsque le boson intermédiaire d'une interaction est massif le processus est différent. C'est le cas, par exemple, de l'interaction nucléaire forte entre nucléons, dont le boson intermédiaire est un méson (²) :

¹ La précision « intermédiaires » est importante : de manière générale, les bosons sont des particules, ou unions de particules, de spin entier, et dont la statistique suit donc la distribution de Bose-Einstein [19]. On peut obtenir un boson par l'union d'un nombre pair de fermions, c'est-à-dire de particules de spin demi-entier, leur somme donnant donc un spin entier : par exemple la paire proton-neutron (ou deuton), les paires proton-proton ou neutron-neutron (ou particules alpha)... Mais de tels bosons ne sont pas échangés dans les interactions fondamentales, ils ne sont pas « intermédiaires » de celles-ci. Lorsque les bosons interviennent comme particules échangées lors des interactions, ils sont dits intermédiaires ou bosons de jauge, et sont des particules virtuelles échangées entre les fermions.

² Il faut bien distinguer l'interaction nucléaire forte entre nucléons (ou plus simplement, interaction nucléaire forte) et

La masse des mésons est relativement élevée : méson pi (π), m $_{\pi}$ = 140 MeV/c², méson êta (η), m $_{\eta}$ = 547,45 MeV/c², méson K, m_K = 490 MeV/c², etc. (en comparaison, pour l'électron m_e = 0,511 MeV/c²). Puisqu'elle est massive, de masse propre m, la particule boson intermédiaire a pour énergie minimale E = mc². Sa durée d'existence, en tant que particule virtuelle, est au plus, d'après les relations d'incertitudes : t ≈ \hbar /mc²; le méson ne peut alors parcourir qu'une distance finie, d'autant plus courte que sa masse est grande :

$$r_0 = ct = \frac{\hbar}{mc} \quad (1.13)$$

La portée de l'interaction r_0 , donnée par (1.13) est le rayon de Yukawa. Lorsque la masse des bosons intermédiaires est grande, cette portée est très réduite. Lorsque m = 0, comme c'est le cas des photons, on retrouve une portée infinie de l'interaction électromagnétique. On a numériquement :

$$r_{0} = \frac{\hbar c}{mc^{2}} = \frac{197}{mc^{2}} \frac{(\text{MeV fm})}{(\text{MeV})} = \frac{3.10^{-43}}{m} \frac{(\text{kg.m})}{(\text{kg})} \quad (1.13\text{bis})$$
Tu as vu, Méson ?
Fred parle enfin de
toi...
Fred a eu raison de prendre
son temps, Photon : du coup
j'ai moins d'incertitude sur
mon énergie, je n'ai pas
envie d'être virtuel l...

où 1 fermi (fm) = 10⁻¹⁵ m. (1.13bis) donne les portées : pour le méson pi 1,4 fm ; pour le boson Z de l'interaction nucléaire faible, 2.10⁻³ fm, etc.

De manière générale, l'interaction de deux fermions par échange d'un boson de jauge s'écrit au premier ordre avec un potentiel de la forme :

$$V_F = \pm \alpha_F \frac{\exp(-r/r_0)}{r}$$
 (1.14)

qui fait intervenir le nombre sans dimension représentant l'intensité de l'interaction :

$$\alpha_F = \frac{QQ'}{\hbar c} = \frac{QQ'}{197} \frac{(\text{MeV.fm})}{(\text{MeV.fm})} \quad (1.15)$$

où Q et Q' sont la « charge » des fermions, propriété de la particule par laquelle elle est sensible à l'interaction, et donc à l'échange de bosons ; r₀ est la portée de l'interaction donnée en (1.13). On peut alors résumer les interactions fondamentales ainsi :

► Interaction gravitationnelle (voir par ex. [7]) : Boson de jauge : graviton (conjecturé), masse m = 0, spin = 2 « Charge » : masse des fermions ; interaction toujours attractive Intensité : $\alpha_G = \frac{Q_G Q'_G}{\hbar c} = \frac{G M M'}{\hbar c}$; si M = m_p = 1,672623.10⁻²⁷ kg = 938,27231 MeV/c² masse du proton, et M' = m_e masse de l'électron, on a $\alpha_G \approx 10^{-42}$ Portée : infinie.

l'interaction forte, ou interaction de couleur : les deux sont des interactions entre quarks, mais la première a pour bosons intermédiaires les mésons, particules massives, tandis que la seconde a pour bosons intermédiaires les gluons, particules de masse nulle, responsables du confinement entre les quarks dans les nucléons. Cependant d'après le formalisme de la chromodynamique quantique, la première dérive de la seconde.

Interaction électromagnétique :

Boson de jauge : photon virtuel, masse m = 0, spin = 1

« Charge » : charge électrique ; interaction attractive si charges de signes opposés, répulsive sinon

Intensité : $\alpha_{em} = \frac{Q_{em}Q'_{em}}{\hbar c} = \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx 1/137$ constante de structure fine, avec +e charge du

proton et -e charge de l'électron. L'interaction électromagnétique est donc 10⁴⁰ fois plus intense que l'interaction gravitationnelle.

Portée : infinie.

► Interaction forte ou de couleur [14] :

Boson de jauge : gluon G^n_k ; masse m = 0; spin = 1; transforme la couleur n d'un quark q en couleur k; les couleurs, au nombre de 3 (« rouge » r, « bleu » b, « vert » g), sont des nombres quantiques associés à différents états des quarks liés à leurs « saveurs » f (il y a 6 saveurs : « up » u, « down » d, « strange » s, « charm » c, « bottom » b, « top » t et leurs opposées), ce qui donne 6 représentations de quarks :

$$q \equiv \operatorname{up}\begin{pmatrix} u_r \\ u_g \\ u_b \end{pmatrix}, \operatorname{down}\begin{pmatrix} d_r \\ d_g \\ d_b \end{pmatrix}, \operatorname{strange}\begin{pmatrix} s_r \\ s_g \\ s_b \end{pmatrix}, \operatorname{charm}\begin{pmatrix} c_r \\ c_g \\ c_b \end{pmatrix}, \operatorname{top}\begin{pmatrix} t_r \\ t_g \\ t_b \end{pmatrix}, \operatorname{bottom}\begin{pmatrix} b_r \\ b_g \\ b_b \end{pmatrix}$$
(1.16)

et l'effet du gluon :

$$G_k^n q_n = q_k \quad n \neq k, \ n, k = r, b, g \quad (1.17)$$

soit 8 gluons puisque dans (1.17) n \neq k qui prennent chacun 3 valeurs possibles de couleur.

Intensité : $\alpha_S \approx 0,1134$, plus élevée donc que celle de l'interaction électromagnétique, d'où le qualificatif de « forte ».

Portée : théoriquement infinie, mais très limitée puisque l'interaction est attractive, de forte intensité, proportionnelle à la distance r entre deux quarks lorsque celle-ci dépasse environ 1 fermi (v. réf. [18]). En effet, le potentiel est de la forme (1.14) mais où r_0 ne fait plus intervenir la masse du boson de jauge, puisque celle-ci est nulle ; le développement aux premiers ordres donne :

$$V_F(r) \approx \frac{A}{r} + Br$$
 (1.18a)

où le comportement de type coulombien et intense A/r est remplacé, au-delà de 1 fermi, par le potentiel linéaire Br. Numériquement, l'expérience donne :

$$V_F(r) = -\frac{150 (\text{MeV.fm})}{r(\text{fm})} + 800 \frac{(\text{MeV})}{(\text{fm})} \times r$$
 (1.18b)

(1.18a,b) montrent que, au-delà de 1 fm, la force F = $- dV_F/dr = -B$ est constante et que l'éloignement de deux quarks nécessite une énergie infinie (l'expérience de séparation conduit à une « hadronisation » des quarks, [18]).

Un quark isolé ne peut donc pas être observé, seules sont observables les paires quark-antiquark et des ensembles de 3 quarks confinés, leur couleur pouvant s'annuler en devenant du « blanc » ; c'est pourquoi le groupe de symétrie de l'interaction forte est noté SU(3)_c ou groupe de couleur (pour comprendre le rôle des groupes de Lie dans les symétries attachées aux interactions fondamentales entre particules élémentaires, voir par exemple [20]).

La seule famille de particules concernées par l'interaction forte de couleur est celle des hadrons. Les leptons ne le sont pas.

Les hadrons sont toujours constitués de quarks, et peuvent être :

- de spin 1/2 (demi entier impair (2n+1)/2) : ce sont alors des baryons, formés de 3 quarks qqq ; sont de cette sous-famille le proton, neutron, et bien d'autres (tableau 1.1) ;

- de spin entier pair 2n : ce sont alors des mésons, formés d'un quark et anti-quark $q \bar{q}$; le méson pi et bien d'autres sont de cette sous-famille (tableau 1.1) ; ils sont décrits par l'équation de Klein-Gordon

pour des champs scalaires réels ou complexes.

Les quarks, constitutifs des hadrons, sont de spin 1/2, et leur charge est Q = +2/3 pour les quarks « up », « charm », « top », et Q = -1/3 pour les quarks « down », « strange », « bottom ».

Les leptons sont de spin 1/2, ils sont considérés « élémentaires » (pas de structure interne) ; ils ont une charge électrique négative ou nulle : électron (e⁻), muon (µ⁻), tau (τ⁻) sont de charge négative -e, et les neutrinos qui peuvent leur être respectivement couplés, v_e, v_µ, v_τ, sont électriquement neutres. L'évolution des états de ces particules est décrite par l'équation de Dirac éventuellement associée à celles de l'électromagnétisme, et ces particules, ainsi que les doublets (leptons chargés / neutrinos)

$$\begin{pmatrix} e^{-} \\ v_{e} \end{pmatrix}$$
 qui est stable, et $\begin{pmatrix} \mu^{-} \\ v_{\mu} \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} \tau^{-} \\ v_{\tau} \end{pmatrix}$ qui sont instables

sont concernés par l'interaction électrofaible.

Le tableau (1.1) récapitule les types de particules élémentaires reconnus dans le modèle standard ; il mentionne alors aussi les bosons de jauge intervenant dans les interactions électromagnétique, forte de couleur, électrofaible.

famille	sous-famille	spin	Exemple de particules	Champ, interaction
hadrons	Baryons = qqq	(2n+1)/2	nucléons: proton p ⁺ , neutron n ⁰ $\Delta, \Lambda, \Sigma, \Omega, \Xi$, etc.	interaction nucléaire forte et interaction forte de couleur
	Mésons = $q \overline{q}$	2n	pions π^0 , π^{\pm} , kaons K ⁰ , K [±] , ψ , D ⁰ , B ⁰ , η, etc.	décrits par éq. de Klein-Gordon (champ scalaire), interaction forte de couleur
leptons		1/2	électron e ⁻ , muon μ^- , tau τ^- neutrinos ν_e , ν_μ , ν_τ et leurs doublets	décrits par éq. de Dirac, interaction électromagnétique
bosons de jauge		1	photon γ	transmet le champ électromagnétique
			gluons g ^k (k=1,,8)	transmet l'interaction forte de couleur
			Z ⁰ , W [±]	transmet l'interaction électrofaible ; ces bosons sont décrits par le champ de Proca hors interaction

tableau 1.1 : famille des particules et les interactions fondamentales (hors gravitation) selon le modèle standard

► Interaction nucléaire forte (interaction entre nucléons) :

Boson : La théorie qui décrit cette interaction n'est pas une théorie de jauge, à la différence de la QCD, car les vecteurs de l'interaction sont des mésons, hadrons formés d'un doublet quark-antiquark, et de spin 2n (se sont donc des bosons mais pas de jauge, de structure non élémentaire). Les mésons, qui sont des hadrons, sont échangés entre des hadrons.

« Charge » : l'interaction se traduit encore par un changement de couleur, mais avec possibilité de saveurs différentes.

Intensité : environ 1, donc cent fois plus forte que l'interaction électromagnétique.

Portée : puisque l'interaction implique des quarks, qui sont nécessairement confinés par l'interaction forte de couleur, elle diminue rapidement en intensité en-dehors du domaine de confinement, de la même manière qu'un dipôle électrique produit un champ décroissant en 1/r³, de plus courte portée que le champ en 1/r² que produirait une charge isolée. Elle est ainsi analogue à une force de Van der Waals responsable de la cohésion de certaines molécules (voir par exemple [21]). En définitive, le modèle de l'interaction nucléaire forte est une dérivée de l'interaction forte de couleur puisqu'elle met en scène les quarks qui échangent des gluons, et elle tend à ne plus être considérée comme une interaction à part de la QCD.

► Interaction électrofaible :

Les particules de matière sont toutes concernées par l'interaction électrofaible décrite dans la QED :

quarks, hadrons, leptons, quelle que soit leur charge (théorie de S.L. Glashow, S. Weinberg, A. Salam). L'interaction électrofaible, lorsqu'elle est au niveau du noyau atomique, est responsable de la radioactivité β.

Bosons de jauge : W⁺, W⁻ (chargés) et Z⁰ (neutre), très massifs :

$$m_W = 80,22 \pm 10,26 \text{ GeV/c}^2$$

 $m_{Z0} = 91,173\pm0,020 \text{ GeV/c}^2$

L'échange de ces bosons permet la transformation des neutrinos en électrons et inversement. Cet échange se traduit par des courants chargés. On montre aussi que le neutrino peut interagir avec d'autres particules sans changement de charge, par échange du boson Z^0 , ce qui correspond à des courants neutres effectivement confirmés par l'expérience. Pour expliquer la masse élevée des bosons de jauge, la théorie introduit le boson de Higgs, qui permet de donner une masse à un boson de jauge par un champ caractérisé par des brisures de symétrie (champs de Higgs) ; elle conduit aux relations entre ces masses et l'angle de Weinberg θ_W qui intervient dans la combinaison des bosons donnant d'autres bosons :

$$m_W = \frac{37,3 \,\text{GeV}}{\sin \theta_W}$$
 et $m_{Z0} = \frac{37,3 \,\text{GeV}}{\sin \theta_W \cos \theta_W}$ (1.19)

que l'expérience a confirmées avec $\sin^2 \theta_W = 0,232$. Le boson de Higgs a été découvert en 2012, au moven du détecteur CMS de l'accélérateur de particules LHC à Genève ([22], [23]).

Intensité : environ 1/30, très faible, ce qui justifie le nom de l'interaction.

Portée : très courte, selon (1.14), puisque les bosons de jauge sont très massifs ; sur leur courte durée de vie de 10⁻²⁴ s les bosons parcourent seulement 10⁻¹⁶ m ; la portée (1.13bis) est très courte 10⁻¹⁸ m ; ces données font que les bosons de jauge de l'interaction électrofaible ne sont pas directement observables, mais révélés par l'intermédiaire des processus de désintégration.

■ Interaction entre particules réelles et particules virtuelles, intégrales de chemin de Feynman (³) :

On montre que le formalisme de la mécanique quantique peut être retrouvé à partir des intégrales de chemin de Feynman. Celles-ci permettent de décrire la propagation, ou l'évolution, d'un système quantique, par exemple une particule, comme un ensemble d'états intermédiaires dont le nombre n'est pas limité a priori, affectés d'une certaine probabilité. Techniquement, les états intermédiaires sont représentés par des fonctions d'onde et sont reliés par un propagateur sur un déplacement infinitésimal dans l'espace et dans le temps. L'évolution totale du système s'exprime comme l'intégrale du propagateur agissant sur la fonction d'onde d'un état initial, ce que l'on appelle intégrale de chemin, et contenant tous les états intermédiaires possibles. À partir de ce formalisme, on retrouve d'ailleurs la propriété de non-séparabilité de la mécanique quantique dont le paradoxe EPR et l'intrication quantique sont des exemples de conséquences.

En <u>Annexe 3</u> on montre la correspondance entre les intégrales de chemin de Feynman et les descriptions du formalisme de Schrödinger et de celui de Heisenberg, tous deux équivalents, fondés sur le principe qu'une variable dynamique est déterminée par l'action d'une observable (opérateur) sur une fonction d'onde. L'équation de Schrödinger, à la base de la mécanique quantique classique, illustre le cas où l'observable est l'énergie (opérateur associé à l'hamiltonien), et peut être obtenue par une traduction ondulatoire de la mécanique, analogue à la traduction de l'optique géométrique en optique ondulatoire ; à la différence près que, en mécanique quantique (traduction ondulatoire de la mécanique classique) les trajectoires sont dans l'espace de configuration et non plus dans l'espace ordinaire. Cette traduction implique d'écrire l'onde quantique avec une phase directement liée à l'action hamiltonienne.

S'agissant des particules virtuelles, la conjecture de Feynman, à la base des intégrales de chemin, introduit la possibilité de traiter des états intermédiaires infinitésimalement proches dans le temps et l'espace, donc auxquels correspondent, par suite des incertitudes de Heisenberg, des variations d'énergie ou d'impulsion associées à des masses de particules virtuelles.

■ Rôle éventuel de l'énergie du vide dans la constante cosmologique :

Une présentation succincte du rôle de la constante cosmologique dans la structure et la dynamique de l'univers a été proposée en référence [25] : dans le modèle cosmologique standard, il est attribué au vide quantique et à ses fluctuations, par l'intermédiaire de ce que l'on nomme « énergie sombre ». La présence de la constante cosmologique semble nécessaire pour expliquer l'accélération de l'expansion de l'univers.

³ Voir par exemple réf. [2].

Pour une analyse détaillée des questions soulevées par la constante cosmologique et son lien éventuel avec l'énergie du vide, consulter par exemple réf. [4], chapitre 12.

1.3 – Problème de l'énergie totale du vide quantique

Chaque mode, défini par une fréquence $v = \omega/2\pi$, possède un niveau d'énergie fondamentale, ou énergie du point zéro, égale à $E_0 = \hbar \omega/2$, correspondant à n = 0 dans (1.1). Pour un seul mode, cette énergie est très faible. Mais le vide quantique, ou vrai vide, contient toutes les énergies du point zéro de tous les modes des systèmes quantiques pouvant exister dans l'univers. Le nombre de modes N par unité de volume est très élevé : on montre qu'il augmente selon dN/d $\omega \propto \omega^2$, et par conséquent la densité spectrale d'énergie par unité de volume croît comme ω^3 .

Si les modes n'étaient pas supérieurement bornés, on aurait alors une énergie totale du vide théoriquement infinie. Ce n'est pas le cas : compte tenu des inégalités de Heisenberg, l'intervalle de temps correspondant, qui devrait dans ce cas être nulle, est bornée inférieurement par le temps de Planck, qui correspond à l'échelle théorique où toutes les interactions fondamentales, y compris gravitationnelle, se-

raient unifiées, $t_p = \sqrt{\frac{G\hbar}{c^5}} = 5,391247(60).10^{-44}s$ (voir par exemple [25]), soit une fréquence maxi-

male v_{max} = 1,9.10⁴³ Hz.

On montre alors que la densité d'énergie totale du vide quantique devrait être égale à 110 fois l'énergie contenue dans le volume du Soleil, ce qui est tout de même énorme. Pourtant, une telle densité d'énergie dans l'univers semble échapper aux observations ; la constante cosmologique, si elle est expliquée par l'énergie sombre, devrait avoir une valeur très grande, or elle est faible : $\rho_{\Lambda} \approx (10^{-3} \, eV)^4$.

Le problème, encore ouvert, consiste à comprendre comment l'énergie totale du point zéro peut-elle être compensée, par quels processus physiques d'énergies opposées, pour arriver à une valeur aussi faible de la densité d'énergie sombre ? Car l'observation montre que l'univers actuel est très proche de sa densité critique, ce qui veut dire que l'expansion serait alors quasiment compensée par la gravitation, et donc la courbure de l'univers serait quasi nulle. Et d'un autre côté, l'existence d'une énergie du point zéro semble bien être mise en évidence avec notamment l'effet Casimir, ou le décalage de Lamb, et bien d'autres observations comme, par exemple dans [26]. Une littérature abondante existe sur cette question, et une bonne introduction sur le sujet peut être trouvée en réf. [9].

2 – Fluctuations du vide quantique

2.1 – Effets du vide quantique en tant que fluctuations du champ électromagnétique

On a vu que les fluctuations du vide quantique s'accompagnent de la création et de la disparition de particules virtuelles, massives (comme des électrons-positrons virtuels) ou non (comme des photons virtuels). Mais ces particules virtuelles ne sont pas directement observables car leur apparition et annihilation sont quasiment instantanées ; seuls sont observables leurs effets. Parmi ceux-ci, on a déjà mentionné l'effet Casimir et l'effet Lamb, mais d'autres effets ont aussi été observés (v. par ex. [27]) :

▶ Effet Casimir : deux miroirs plans se faisant face, placés dans le vide, subissent une force attractive que l'on peut attribuer à une sélection de modes de fluctuations du point zéro entre la cavité séparant les miroirs et le restant du volume (voir paragraphe <u>3</u>) (v. [1], [12], [28], [29], [30], [31], [32]...).

► D'autres effets, liés à l'effet Casimir ou voisins de celui-ci, ont été observés : un miroir en mouvement oscillatoire dans le vide subit une force de dissipation [33], une cavité entre deux miroirs oscillant selon des modes spéciaux produit une amplification du mouvement et du rayonnement [34], etc. Les « bruits » des photons dans le vide sont aussi révélateurs des fluctuations de celui-ci [40].

▶ Des dispositifs mis en œuvre par VIRGO (en Italie) et LIGO (aux États-Unis), utilisant des faisceaux lasers de grande précision et des miroirs de 40 kg refroidis dans le vide, destinés à détecter des ondes gravitationnelles, ont mis en évidence directement des fluctuations du vide quantique sur une distance de 10⁻²⁰ m, v. [35].

► Une équipe de ETH Zürich a mis en évidence la modification de la lumière entre des atomes d'un cristal super froid due au vide quantique qui les sépare, à divers instants et positions : le spectre du champ électromagnétique à son niveau fondamental (état zéro) a ainsi pu être établi (v. [36]).

► Des chercheurs de l'UC Berkeley ont mis en évidence le transfert thermique dans le vide entre des membranes de nitrure de silicium recouvertes d'or séparées de quelques centaines de nanomètre : le chauffage d'une membrane a produit celui de l'autre (v. [37], [38]).

► Dans un article de 1998, K. Scharnhorst (Humboldt University Berlin), considérant que l'interaction

entre un photon réel et des photons virtuels émergeant du vide quantique devrait conduire à une variation très brève de la vitesse du photon réel, arrive à la conclusion que la vitesse de la lumière dans le vide n'est pas rigoureusement constante (v. [39]). Ceci semble contredire le principe adopté par la relativité d'Einstein : mais aux échelles quantiques, de toutes façons, la Relativité se trouve en butte aux inégalités de Heisenberg, situation qui, depuis des décennies, est responsable de la difficulté d'unifier, dans une théorie englobante, la gravitation et le formalisme quantique des interactions. À ce sujet, une synthèse des difficultés rencontrées actuellement en physique concernant la cosmologie, l'énergie du vide quantique, les trous noirs et l'unification des interactions est présentée dans [10] (J-P. Luminet).

2.2 - Décalage de Lamb ([41], [42], [43]) :

Les deux niveaux électroniques $2S_{1/2}$ et $2P_{1/2}$, rattachés au niveau de nombre quantique principal n = 2, de l'atome d'hydrogène ont même énergie selon la théorie de Dirac de l'électron. Cependant W.E. Lamb et R. Retherford, en 1947, observèrent un décalage du spectre (dédoublement des raies d'émission de ces niveaux) (fig. 2.1). traduisant une différence d'énergie entre ces niveaux : intervalle d'environ 1 GHz. C'est Hans Bethe qui expliqua le premier cet effet par l'interaction de l'électron avec le vide quantique. Les fluctuations du vide quantique créent, entre autres particules, des paires électron-positron virtuelles. L'électron réel de l'atome d'hydrogène interagit un bref instant avec le positron de ces paires, ce qui entraîne une très faible modification de son orbite, observable par le décalage spectral entre les deux niveaux d'énergie ([42], [44]).

Sans entrer dans les détails de la QED, on montre (v. [45]) que l'écart d'énergie entre les niveaux $2S_{1/2}$ et $2P_{1/2}$ produit par les fluctuations du vide s'explique, en première approximation, par :

 La présence de fluctuations quantiques E'(r,t) du champ électrique : elle entraîne une fluctuation de la position r du centre de masse de l'électron, puisque :

$$m\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = e \mathbf{E}'(\mathbf{r}, t)$$

- L'électron se déplace, sous l'effet des fluctuations du vide, à l'intérieur d'un domaine, supposé sphérique de rayon **r**', avec $r = r_0 + r'$ (**r**₀ position moyenne de l'électron en présence du seul champ coulombien non perturbé).
- La position fluctuante moyenne de l'électron étant nulle, < r' > = 0, le potentiel électrique moyen total est :

$$=V(r)+\frac{1}{6}\nabla^{2}V(r)$$
 (2.1)

- La position fluctuante moyenne vérifie :

$$< r'^{2} > = \frac{e^{2}}{2m^{2}} \int \frac{d^{3}k}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar}{\varepsilon_{0}c^{3}k^{3}} = \frac{2e^{2}\hbar}{\pi m^{2}c^{3}} \ln \frac{\lambda_{C}}{a_{0}}$$
 (2.2)

- où $\lambda_c = \hbar/mc$ longueur d'onde Compton de l'électron de masse m, a₀ rayon de Bohr

$$a_0 = \frac{\hbar}{mc\alpha} = \frac{\lambda_C}{\alpha} = 5,2918.10^{-11} \,\mathrm{m}$$

avec $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$ constante de structure fine.

De (2.1) et (2.2) on déduit que les fluctuations du vide apportent un terme supplémentaire au potentiel électrique coulombien, donné par :

$$V_{QED} = \frac{4e^4\hbar}{3m^2c^3} \ln\frac{\lambda_C}{a_0} \cdot \delta(\mathbf{r})$$

qui induit une perturbation à l'ordre 1 de l'énergie, sous forme d'un décalage, égale à :

$$\Delta E = <\psi |V_{QED}|\psi > = \frac{4e^4\hbar}{3m^2c^3} \ln \frac{\lambda_C}{a_0} \cdot |\psi(0)|^2 \quad (2.3)$$

ψ étant la fonction d'onde de l'électron, avec $|ψ(0)|^2 \approx \frac{1}{a_0^3}$, d'où un décalage ΔE ≈ 1 GHz.



figure 2.1 : différents niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène selon les modèles : par rapport à la théorie de Dirac des électrons, où les niveaux 2S_{1/2} et 2P_{1/2} sont identiques (colonne « Dirac »), la QED explique le décalage entre ces deux niveaux (colonne « Lamb » par l'interaction avec les fluctuations du vide (réf. [42])

2.3 – Rayonnement de Hawking ou évaporation des trous noirs

Au voisinage d'un trou noir l'énergie gravitationnelle est élevée au point d'augmenter les fluctuations du vide, avec création de paires de particules-antiparticules virtuelles. En l'absence de trou noir celles-ci finissent par s'annihiler. En présence de trou noir, elles peuvent être séparées avant l'annihilation : l'une reste en-dehors, l'autre franchit l'horizon du trou noir et est absorbée par lui. C'est « l'effet de marée » gravitationnelle au voisinage d'un trou noir.

En termes de bilan d'énergie, la particule virtuelle qui échappe à l'extérieur possède une énergie positive qui contribue au rayonnement émis par le trou noir, tandis que la particule virtuelle qui est absorbée par le trou noir apporte à celui-ci une énergie négative, interprétée par une diminution de sa masse : au final, le trou noir « s'évapore » [47] (rayonnement de Hawking) (figure 2.2).



figure 2.2 : Principe du rayonnement de Hawking (d'après [46])



Stephen Hawking (Crédit : GrayWizard.net)

D'après le théorème de « calvitie » du trou noir (W. Israel, D.C. Robinson, B. Carter, R. Penrose, R. Ruffini, voir [48], [10]) les trous noirs statiques se caractérisent par uniquement trois grandeurs : la masse M, le moment angulaire J, et la charge électrique Q. Il s'ensuit que, lors de l'effondrement d'une étoile en trou noir, une très grande quantité d'information est perdue : différents types de matière, de charges, de moments multipolaires, etc. Toutes les informations physiques, exceptées (M, J, Q), sont « avalées » par le trou noir, vu depuis un observateur extérieur. Cette perte d'information doit alors correspondre à une augmentation de l'entropie du trou noir. Comme c'est au niveau de l'horizon des événements du trou noir (⁴) que se produit la perte d'information, on peut s'attendre à ce que l'entropie soit reliée à la surface A de l'horizon.

Or J. Bekenstein [49] et S. Hawking ont montré que l'entropie est proportionnelle à la surface de l'horizon :

⁴ Sur le concept d'horizon, en relativité, voir par exemple [25].

$$S = \frac{c^3 k_B}{G\hbar} \frac{A}{4} \quad (2.4)$$

(k_B constante de Boltzmann). Un problème est alors que, comme l'a proposé Bekenstein, l'augmentation d'entropie d'un système thermodynamique est associée à une température, donc le trou noir doit rayonner de la chaleur. La température à l'horizon est inversement proportionnelle à la masse :

$$T_{H} = \frac{\hbar c^{3}}{8\pi G k_{B}} \frac{1}{M} \approx 6,17.10^{-8} \frac{M_{\odot}}{M}$$
 (2.5)

où Mo masse du Soleil, dans l'hypothèse d'un horizon d'un espace-temps 4D de Schwarzschild :

$$ds^{2} = -\left(1 - \frac{2GM}{rc^{2}}\right)c^{2}dt^{2} + \frac{dr^{2}}{1 - \frac{2GM}{rc^{2}}} + r^{2}(d\theta^{2} + \sin^{2}\theta d\phi^{2})$$

où la singularité apparaît au rayon de Schwarzschild $r = r_S = \frac{2GM}{c^2}$. D'après (2.5) un trou noir d'une

masse solaire a une température à l'horizon de 6,15.10⁻⁸ K, elle augmente lorsque M diminue par évaporation. Les relations (2.4) et (2.5) sont cohérentes avec la théorie selon laquelle, lorsque l'on prend en compte les effets quantiques, le trou noir est en équilibre thermodynamique et rayonne comme un corps noir. Son énergie interne, selon le premier principe de la thermodynamique (⁵)

$$d U = T_H dS + \dots$$

est directement reliée à la masse du trou noir, $dU = c^2 dM$, impliquant que TH doit être directement reliée à la « gravité de surface » (de l'horizon) :

$$\kappa = \frac{1}{4} \frac{c^4}{GM} \quad (2.6)$$

ce qui est le cas, avec (2.5), comme l'a montré Hawking.

De manière générale, la gravité de surface κ varie selon le type de trou noir ; par exemple un trou noir de Schwarzschild est tel que son rayon r_s est proportionnel à la masse, comme on l'a vu. Mais plus généralement, compte tenu du théorème de calvitie, on a une relation de la forme :

$$M = f(A, J, Q) \quad (2.7)$$

et l'on montre que la variation de la masse du trou noir en fonction de la surface de son horizon fait intervenir uniquement les effets de gravitation :

$$\frac{\partial M}{\partial A} = \frac{\kappa}{8\pi G} \quad (2.8)$$

κ représente donc la vitesse avec laquelle le champ de gravitation augmente lorsque la distance entre une particule externe et l'horizon se réduit. Notons que, pour un trou noir de Schwarzschild, on a :

$$\kappa = \frac{GM}{r_S^2}$$

autrement dit κ est le champ de gravitation sur l'horizon, et donc :

⁵ Sur des questions relatives à la thermodynamique, l'entropie des trous noirs, et son évolution, voir par exemple, <u>références</u> [50] à [58].

$$A = 4\pi r_S^2 = 16\pi \left(\frac{GM}{c^2}\right)^2$$
 (2.9)

L'évaporation thermique du trou noir, en tant que rayonnement d'un corps noir, devrait cependant dissiper toute l'énergie du trou noir au bout d'un certain temps, que l'on peut déterminer comme suit : La puissance rayonnée est donnée par la loi de Stefan :

$$L = 4\pi r_S^2 \sigma T_H^4$$

où $\sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{60 c^2 \hbar^3} = 5,67.10^{-8} (Wm^{-2} K^{-4})$ est la constante de Stefan. Cette puissance est égale à celle

de la perte d'énergie associée à la masse :

$$\frac{d}{dt}(Mc^2) = -L = -4\pi r_S^2 \sigma T_H^4$$

En utilisant l'expression de r_s, il vient :

$$\frac{dM}{dt} = -\frac{1}{15360\pi} \frac{c^4\hbar}{G^2} \frac{1}{M^2}$$

soit un temps d'évaporation :

$$t_e = 5120 \pi \frac{G^2}{c^4 \hbar} M^3 = 5120 \pi \left(\frac{M}{M_p}\right)^3 t_p$$
 (2.10)

soit :

$$t_e(s) = 6.6.10^{74} \left(\frac{M}{M_{\odot}}\right)^3$$
 (2.10bis)

où tp et Mp sont respectivement le temps et la masse de Planck :

$$t_p = \sqrt{\frac{G\hbar}{c^5}} = 5,391247.10^{-44}s$$
$$M_p = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}} = 2,176434.10^{-8}kg$$

Un trou noir de même masse que le Soleil s'évaporerait donc en 10⁶⁷ ans, ce qui est largement plus grand que l'âge de l'univers observé actuellement (~ 13,7.10⁹ ans). L'entropie correspondante serait de l'ordre de 10⁷⁸ JK⁻¹; en termes de nombre de configurations internes possibles d'obtenir un tel trou noir, cela équivaut à une quantité d'information gigantesque : de l'ordre de 10⁶⁵ bits d'information dans 1 cm² de surface d'horizon.

On a vu qu'un trou noir stellaire, de masse égale à celle du Soleil, a une température $T_H = 6,15.10^{-8}$ K, donc très faible devant celle du fond diffus cosmologique $T_{CMB} \sim 2,7$ K [25]. Avec l'expansion cosmologique, qui semble s'accélérer, cette température diminuera et atteindra T_H au bout de 18/H environ, où H est la constante de Hubble actuelle (H ~ 72 km.s⁻¹Mpc⁻¹), soit au bout de 244 milliards d'années. Ce délai a été estimé en supposant que l'univers est en expansion isentropique, c'est-à-dire telle que le facteur d'échelle cosmologique a(t) et la température T(t) vérifient : a(t)T(t)=cste

avec, pour un univers de courbure quasi nulle et dont l'expansion est dominée par la constante cosmologique : $a(t)=cste \times exp(Ht)$.

Tant que $T_H < T_{CMB}$ le trou noir ne peut pas rayonner de l'énergie, au contraire, il absorbe du rayonnement. Les trous noirs qui peuvent actuellement rayonner, c'est-à-dire tels que $T_H > T_{CMB}$, doivent

avoir une masse suffisamment petite, de l'ordre de $M \le M_{min} = \frac{6.15 \cdot 10^{-8}}{T_{CMB}} M_{\odot} \approx 4.5 \cdot 10^{22} kg$ soit la

masse d'une petite planète. Noter que cette masse correspond à un trou noir très petit, d'après (2.9) :

$$r_{\rm S\,min} = \frac{2\,G\,M_{min}}{c^2} = 6.7.10^{-5}\,m$$

La formation de trous noirs aussi petits n'est pas actuellement explicable, mais on peut supposer qu'ils aient pu exister aux ères primordiales de l'univers (ère de Planck, ère de l'inflation...) et que leur rayonnement pourrait nous parvenir. Entre-temps leur évaporation diminuerait leur masse à environ 10^{12} kg, avec donc, d'après (2.5), une température à l'horizon de ~ 10^{11} K. Leur rayonnement serait donc à chercher dans le domaine des rayons gamma, mais cela n'a pas encore été observé.

L'évaporation thermique du trou noir pose un paradoxe vis-à-vis de la micro-réversibilité des états quantiques. À supposer qu'un trou noir suffisamment petit puisse s'évaporer en un temps au plus égal à l'âge de l'univers, son information contenue dans son horizon disparaîtrait complètement avec le rayonnement thermique. Cela est contradictoire avec la propriété issue du formalisme quantique, énonçant que l'évolution des états quantiques, suivant l'équation de Schrödinger, et plus généralement, les intégrales de chemin de Feynman (<u>Annexe 3</u>) conserve l'information. Ce paradoxe est encore aujourd'hui un problème ouvert.

3 – Effet Casimir

3.1 – Force attractive entre deux plaques parallèles parfaitement conductrices, placées dans le vide

L'existence de cette force, très fréquemment attribuée aux fluctuations du vide quantique, a été prévue par Hendrik Casimir en 1948 (on verra, cependant, au point 3.2, un exemple, parmi d'autres, d'explications qui ne font pas référence à ces fluctuations).

Ces fluctuations sont principalement associées aux états zéro du champ électromagnétique ; plus généralement, pour une interaction quelconque, elles se traduisent par l'apparition suivie d'annihilation de paires de particules-antiparticules virtuelles. Le vide quantique est une superposition de modes ondulatoires de divers champs, pour diverses fréquences fondamentales. Pour le champ électromagnétique il s'agit de la superposition de ses différents états auxquels sont associés les photons créés et absorbés par le vide : dans ce cas, puisque les photons (et plus généralement les bosons) sont leurs propres antiparticules, ce ne sont pas des paires de particules-antiparticules virtuelles qui entraînent les fluctuations du vide, mais les photons virtuels.

Dans un espace vide non borné, la superposition de modes peut être a priori en nombre quelconque : aux fréquences, en nombre théoriquement infini, correspondent des modes d'oscillations pouvant prendre des valeurs entières elles aussi a priori non bornées. Par contre, l'espace contenu entre deux plaques idéales disposées en parallèle dans le vide contient des modes normaux dont les valeurs maximales sont limitées directement par la taille de cet espace. En conséquence, les fluctuations du vide quantique entre les plaques sont différentes de celles de l'espace libre : on doit donc s'attendre à une différence d'énergie du vide entre l'extérieur, où la densité d'énergie est plus grande, et l'intérieur où elle est limitée, entraînant ainsi une différence de pression qui rapproche les plaques.



Hendrik Brugt Gerhard Casimir (1909–2000) Crédits : Anefo, CC BY-SA 3.0 via Wikimedia Commons Voici une manière d'évaluer la force attractive de Casimir pour deux plaques planes idéales de surface A, placées en parallèle dans le vide et distantes de D (figure 3.1) :



figure 3.1 : Configuration idéale de l'effet Casimir : deux plaques parfaitement lisses, conductrices, et parallèles, avec A >> D², placées dans le vide à T = 0K, sont soumises à une force attractive attribuée aux fluctuations du vide quantique

On verra au <u>chapitre 4</u> que l'hamiltonien du champ se décompose en hamiltoniens de modes n de fréquence $v = \omega/2\pi$:

$$H = \sum_{n} H_{n}$$

avec :

$$H_n = \left(N_n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

avec l'opérateur nombre de quanta dans les états du mode n :

$$N_n = b_n^+ b_n$$

où b_n^+ et b_n sont respectivement l'opérateur de création et l'opérateur d'annihilation. Les valeurs propres de H_n sont donc :

$$E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2})$$
, $n \in \mathbb{N}$

Pour toute pulsation ω l'énergie fondamentale, correspondant à n = 0, est donc non nulle, ce qui est cohérent avec le principe d'incertitude de Heisenberg. C'est l'énergie du point zéro.

Puisque les plaques sont supposées parfaitement conductrices, dans l'espace situé entre elles, les modes stationnaires du champ électromagnétique à une pulsation ω sont contraints, suivant Ox perpendiculaire aux plaques, par la longueur qui les sépare D, leurs nombres d'onde sélectionnés étant :

$$k_x = n_x \frac{\pi}{D}$$
, $n_x \in N$ (3.1)

tandis que suivant Oy et Oz, parallèles aux plaques, les modes ont pour nombres d'onde :

$$k_y = n_y \frac{\pi}{L_y}$$
, $k_z = n_z \frac{\pi}{L_z}$, $n_y, n_z \in \mathbb{Z}$ (3.2)

où l'on suppose $A = L_y L_z >> D^2$.

La pulsation et le vecteur d'onde $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = (n_x, k_y, k_z)$ de chaque mode vérifient la relation de dispersion :

$$\omega(n_x, k_y, k_z) = c \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = c \sqrt{n_x^2 \frac{\pi^2}{D^2} + k_y^2 + k_z^2}$$
(3.3)

Chaque mode a une énergie du point zéro notée $E_0(n_x, k_y, k_z) = \frac{1}{2}\hbar\omega(n_x, k_y, k_z)$. Dans l'hypothèse idéale de T = 0K, l'énergie électromagnétique dans l'espace entre les plaques est alors la somme des énergies de point zéro de chaque mode :

$$E_{0} = \sum_{n_{x}, k_{y}, k_{z}} E_{0}(n_{x}, k_{y}, k_{z})$$
(3.4)

Comme les modes (n_x, k_y, k_z) ne sont pas bornés, la somme (3.4) des E₀(n_x, k_y, k_z) est divergente. Pour lever cette difficulté, on utilise le résultat suivant : les modes de très hautes fréquences ω ne contribuent pas à la somme parce que, à ces fréquences, tout matériau cesse d'être un conducteur parfait : il devient isolant au champ électromagnétique, c'est-à-dire diélectrique. Cela se traduit par l'existence d'une fréquence de coupure ω_c qui intervient dans la somme sous forme d'une pondération de ses termes par une fonction de coupure K(ω/ω_c) telle que :

- régularité à l'origine : K(0) = 1 - coupure raide : $\lim_{\omega \ge \omega_c} K^{(p)}(\frac{\omega}{\omega_c}) = +\infty$ où K^(p) est la dérivée d'ordre p.

Un conducteur est donc parfait si $\omega_c \to +\infty$ et donc $K(\omega/\omega_c) \to 1$ quelle que soit ω . On obtient alors la somme finie :

$$E_{0} = \sum_{n_{x}, k_{y}, k_{z}} E_{0}(n_{x}, k_{y}, k_{z}) K\left(\frac{\omega(n_{x}, k_{y}, k_{z})}{\omega_{c}}\right) \quad (3.5)$$

Avec l'hypothèse $A = L_y L_z >> D^2$ (longueurs d'onde courtes dans la cavité), (3.5) est remplacée par :

$$\begin{split} E_0 &= \sum_{n_x} \lim_{L_y L_z \to \infty} \frac{2\pi}{L_y} \frac{2\pi}{L_z} \sum_{k_y, k_z} E_0(n_x, k_y, k_z) K(\frac{\omega}{\omega_c}) \\ &= \sum_{n_x} \frac{A}{(2\pi)^2} \int E_0(n_x, k_y, k_z) K(\frac{\omega}{\omega_c}) dk_y dk_z \end{split}$$

où l'on a posé $\omega = \omega(n_x, k_y, k_z)$, soit :

$$E_{0} = 2 \frac{A}{(2\pi)^{2}} \sum_{n_{x}=0}^{+\infty} \varepsilon_{x} \int E_{0}(n_{x}, k_{y}, k_{z}) K(\frac{\omega}{\omega_{c}}) dk_{y} dk_{z} \quad (3.6)$$

où $\varepsilon_x = 1/2$ si $n_x = 0$, et 1 sinon, puisque ce mode fondamental $n_x = 0$ est le seul à ne pas être dégénéré (les autres modes sont doublement dégénérés). On pose $\mathbf{k}' = (k_y, k_z)$ le vecteur d'onde des modes parallèles aux plaques. Puisque l'intégrale dans (3.6) porte sur \mathbf{k}' avec n_x fixé, (3.3) donne :

$$\omega d \omega = c^2 k' d k'$$

avec k' = ||k'||, (3.6) donne alors :

$$E_0 = 2 \frac{A}{(2\pi)^2} \sum_{n_x=0}^{+\infty} \varepsilon_x \int_0^{+\infty} 2\pi k' dk' E_0(\omega) K(\omega/\omega_c)$$
$$= 2 \frac{A}{(2\pi)^2} \sum_{n_x=0}^{+\infty} \varepsilon_x \int_{\omega_x}^{+\infty} \frac{2\pi}{c^2} E_0(\omega) K(\omega/\omega_c) \omega d\omega$$

où l'on a posé $\omega_x = \omega(n_x, 0, 0) = n_x \frac{c \pi}{D}$, il vient :

$$E_0 = \frac{A}{\pi c^2} \sum_{n_x=0}^{+\infty} \varepsilon_x \int_{\omega_x}^{+\infty} E_0(\omega) K(\omega/\omega_c) \omega d\omega \quad (3.7)$$

Par hypothèse, (3.7) est l'énergie du vide situé entre les deux plaques : $E_L = E_0$. Elle produit une force donnée par :

$$F_{L} = -\frac{\partial E_{L}}{\partial D} = -\frac{A}{\pi c^{2}} \sum_{n_{x}=0}^{+\infty} \frac{\varepsilon_{x}}{D} \omega_{x}^{2} E_{0}(\omega_{x}) K(\omega_{x}/\omega_{c})$$

puisque l'on a :

$$\delta E_L = \frac{A}{\pi c^2} \sum_{n_x=0}^{+\infty} \varepsilon_x E_0(\omega_x) K(\omega_x/\omega_c) \omega_x d\omega_x ,$$

$$\omega_x d\omega_x = n_x^2 \frac{c^2 \pi^2}{D^3} dD \rightarrow \omega_x \frac{d\omega_x}{dD} = \frac{n_x^2 c^2 \pi^2}{D^3} = \frac{\omega_x^2}{D}$$

et $K(\omega_x/\omega_c) \rightarrow 1$; et donc, avec $E_0(\omega_x) = \frac{1}{2}\hbar\omega_x$:

$$F_{L} = -\frac{A}{\pi c^{2}} \sum_{n_{x}=0}^{+\infty} \frac{\varepsilon_{x}}{D} \omega_{x}^{2} \frac{1}{2} \hbar \omega_{x} K(\omega_{x}/\omega_{c})$$

soit :

$$F_{L} = -A \frac{\pi^{2} \hbar c}{2 D^{4}} \sum_{n_{x}=0}^{+\infty} \varepsilon_{x} n_{x}^{3} K(\omega_{x}/\omega_{c}) \quad (3.8)$$

La force due à l'énergie du vide extérieur aux plaques, dans l'espace libre, F_F , est obtenue à partir de (3.8) en considérant D très grand, et donc en remplaçant la somme en n_x par l'intégrale :

$$F_F = -A \frac{\pi^2 \hbar c}{2D^4} \int_0^\infty n^3 K(\frac{\omega(n)}{\omega_c}) dn \quad (3.9)$$

La force résultante sur les plaques est la différence entre FF et FL :

$$\Delta F = -A \frac{\pi^2 \hbar c}{2 D^4} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon(n) n^3 K\left(\frac{\omega(n)}{\omega_c}\right) - \int_0^{\infty} n^3 K\left(\frac{\omega(n)}{\omega_c}\right) dn \right]$$

où l'on a noté n = n_x. En posant $f(n) = n^3 K(\omega(n)/\omega_c)$, le terme entre [...] est donné par la série d'Euler-Maclaurin :

$$\sum_{k=p}^{q} g(k) - \int_{p}^{q} g(x) dx = \frac{g(p) + g(q)}{2} + \sum_{m=1}^{r} \frac{b_{2m}}{(2m)!} (g^{(2m-1)}(q) - g^{(2m-1)}(p)) + R_{r}$$

où b_{2m} sont les nombres de Bernoulli et R_r le reste à l'ordre r. Appliquée à f(n) et p = 0, q = + ∞ , on a :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon(n) f(n) - \int_{0}^{\infty} f(n) dn = -\frac{1}{12} f'(0) + \frac{1}{6!} f^{(3)}(0) + O(f^{(r)}(0))$$
(3.10)

De f'(0) = 0, f⁽³⁾ (0) = 6K(0), f⁽⁵⁾(0) = O(ω_c^{-2}), et puisque f(+ ∞) = 0, il vient :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon(n) f(n) - \int_{0}^{\infty} f(n) dn = \frac{1}{5!} + O(\omega_c^{-2})$$

On obtient la force attractive entre les deux plaques parfaitement conductrices, à température strictement nulle (cas idéal) :

$$\Delta F = -A \frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{D^4} \quad (3.11)$$

On note que cette force de Casimir ne dépend pas de la nature des matériaux, hormis l'hypothèse de conducteurs parfaits.

L'énergie associée à cette force est l'énergie des points zéro entre les plaques, obtenue par intégration de (3.11) :

$$\Delta E = -A \frac{\pi^2}{720} \frac{\hbar c}{D^3} \quad (3.12)$$

Cependant, les choses se compliquent dans les cas réels, non idéaux, où divers facteurs intreviennent :
 ▶ Effets de la température : la température T = 0K ne pouvant pas être rigoureusement atteinte, ces effets interviennent de manière importante dans les bilans d'énergie ; voir par exemple réf. [1], [64], [65] …
 ▶ La géométrie des surfaces entre lesquelles ont lieu les fluctuations du vide quantique influence fortement celles-ci ; on cite entre autres la force entre une plaque plane et une sphère dans le vide (théorie de Derjaguin...), voir par ex. réf. [1], [13], [59], [65] …

► Dans certains cas, il semble que la force de Casimir soit présente sur des distances relativement grandes ; voir par ex. réf. [60] ...

▶ Par ailleurs, de nombreux auteurs décrivent diverses applications de l'effet Casimir, non en termes d'utilisation énergétique (car on ne peut extraire de l'énergie depuis le vide quantique), mais en termes de prise en compte dans des processus microphysiques, comme les nanotechnologies, et même biophysiques (car les forces de type Casimir seraient de même ordre de grandeur que les interactions au niveau ou entre les structures ADN ou ARN) ; voir par ex. réf. [61], [65] ...

▶ ... et parmi les conséquences physiques de l'effet Casimir des études mentionnent leurs rôles dans les phénomènes critiques ; voir par ex. réf. [62], [63] ...

3.2 – La force de Casimir est-elle obligatoirement due aux fluctuations du vide quantique ?

Il existe toutefois de nombreuses études dont les conclusions mettent en doute la réalité de l'énergie du point zéro comme énergie des fluctuations du vide. Parmi elles, certaines mettent en avant l'intervention de la constante de structure fine α dans les interactions présentes entre structures placées dans le vide proche de T = 0K. Il ne serait donc point besoin d'invoquer une énergie propre au vide, mais d'imputer ces interactions à des cas limites de champs de nature électromagnétique et de type Van der Waals. Dans ce cas, puisque l'effet Casimir ne serait pas propre au vide mais attribué au cas limite où α tend vers l'infini, on pourrait obtenir des effets de même nature dans des configurations autres que le vide. Citons par exemple l'étude réf. [11] où l'effet Casimir peut être calculé sans référence au vide et qui considère que les fluctuations du point zéro apparaissent comme une modélisation auxiliaire.

Cette analyse critique souligne aussi l'absence d'expérience cruciale démontrant la réalité des énergies du point zéro, et donc le caractère arbitraire de l'interprétation de l'effet Casimir en tant que manifestation du vide quantique. Il ne serait pas plus nécessaire pour l'effet Casimir de recourir aux fluctuations du vide, que pour les autres interactions modélisées en QED (électrodynamique quantique) pour prédire des effets représentés par des diagrammes de Feynman à une boucle : le premier comme les autres est un cas limite où la constante de structure fine tend vers l'infini, sans pour autant changer la nature du champ. D'ailleurs, ce serait la situation rencontrée dans l'effet du décalage de Lamb (v. point 2.2). Des tentatives de formaliser la QED en excluant les fluctuations du point zéro ont été faites tôt, à l'inverse, des modèles, comme celui de P.W. Milonni (1994) reposent entièrement sur ces fluctuations.

Les conséquences de la réalité ou bien de la non réalité des fluctuations du vide quantique, et de leur énergie portée par leurs particules virtuelles, affectent la cosmologie à travers l'interprétation de la constante cosmologique dont le rôle dans l'expansion est déterminant.

Dans l'étude [11], l'auteur R.L. Jaffe fait remarquer que le caractère « universel » de la force de Casimir, au sens où elle fait intervenir seulement les constantes fondamentales h et c, provient du fait que l'on fait abstraction des propriétés électrodynamiques des corps en présence, qui interviennent via le couplage exprimé par la constante de structure fine (et donc, en particulier, de la charge) dans les plaques conductrices. Dans les relations (3.11) et (3.12), α n'intervient pas et l'on peut l'interpréter comme le cas limite où il tend vers l'infini, transformant ainsi les interactions électrodynamiques en force de Van der Waals relativistes entre les plaques. En termes de méthode de calcul, le comportement de type Casimir s'obtient par les diagrammes de Feynman avec lignes externes, sans se référer aux fluctuations du vide. Si l'on prend en compte qu'un conducteur possède une pulsation de plasma ω_P (due aux électrons libres dans le matériau, de densité numérique n) et une épaisseur de peau $\delta(\omega)$, toutes deux dépendant de la constante de structure fine α :

$$\omega_P^2 = \frac{4\pi n e^2}{m} , \quad \delta^2 = \frac{m c^2}{2\pi \omega n e^2} |\gamma_0 - i\omega|$$

où γ_0 est le paramètre d'amortissement des oscillations du plasma, les plaques sont considérées comme parfaitement conductrices si $\frac{c}{D} \ll \omega_p$; on montre que cela implique que α peut être considérée comme relativement très grande devant les caractéristiques et la géométrie des matériaux :

$$\alpha >> \frac{mc}{4\pi\hbar nD^2} \quad (3.13)$$

autrement dit, que l'on est dans le cas limite $\alpha \rightarrow +\infty$. Ce cas limite est aisément obtenu expérimentalement pour des plaques en métal distantes de 0,5 micron puisque (3.13) donne :

$$\alpha \approx \frac{1}{137} >> 10^{-5}$$

La théorie montre que l'expression de la force de Casimir devient infinie aux fréquences plus grandes que ω_P et que la force entre les plaques doit prendre en compte les caractéristiques électrodynamiques et géométriques. On montre plus généralement que l'interaction entre deux surfaces non forcément planes (par exemple entre une sphère et une plaque) fait intervenir α à différents ordres et que, lorsque $\alpha \rightarrow 0$, son intensité s'annule : on ne pourrait donc pas l'attribuer à la fluctuation du vide puisque celle-ci est supposée indépendante de α .

4 – Opérateurs de création et d'annihilation, perturbations de l'hamiltonien du champ

4.1 - Pour expliquer l'état du point zéro (et les fluctuations associées) il faut :

- définir les opérateurs de création et d'annihilation en physique quantique ;

- ceci nécessite d'exprimer les perturbations de l'hamiltonien du champ ;

- ces opérateurs s'utilisent dans le couplage du champ avec des particules.

On développera ces concepts avec l'exemple du champ scalaire classique, sachant que en physique des particules et en cosmologie quantique les autres natures de champ sont importantes : champ spinoriel (théorie de Dirac), champ scalaire de brisure de symétrie (champ des bosons de jauge de Higgs), champ vectoriel (tel que ceux de l'électromagnétisme, et plus généralement de Proca), champ tensoriel (adapté à la description des interactions entre la gravitation et les autres champs, donc en cosmologie). Pour mémoire, les champs sont des domaines où des particules sont crées et sont annihilées, ce qui fait l'objet du formalisme des opérateurs création et annihilation ; ces particules ont des spins caractérisés par la nature du champ (en unité \hbar) : celles du champ scalaire sont de spin 0, celles du champ spinoriel (fermions par exemple) sont de spin 1/2, celles du champ vectoriel (photons par exemple) sont de spin 1, celles du champ tensoriel (gravitons par exemple [7]) sont de spin 2, etc.

4.2 - Perturbations de l'hamiltonien

Elles s'expriment au moyen de l'opérateur d'évolution qui agit sur un état quantique décrit par la fonction d'onde |u(t)>. L'opérateur d'évolution est introduit sous l'hypothèse fondamentale que l'évolution est causale : un état quantique |u> connu à un instant t_0 évolue vers un autre état à une date ultérieure $t > t_0$, et cette évolution est prédictible. De plus, l'hypothèse selon laquelle la superposition des états, supposée linéaire, est maintenue lors de l'évolution. Ces hypothèses amènent à la relation entre deux états à l'instant t_0 et l'instant t :

$$|u(t)\rangle = U(t, t_0)|u(t_0)\rangle$$
 (4.1)

où U(t,t₀) est l'opérateur d'évolution agissant dans l'espace de Hilbert des vecteurs états quantiques |u>. U vérifie la condition initiale :

$$U(t_{0,}t_{0}) = 1$$

et la relation de composition où un temps intermédiaire quelconque t intervient :

$$U(t, t_0) = U(t, t')U(t', t_0)$$

Les fonctions d'onde, vecteurs de l'espace de Hilbert, vérifient l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|u(t)\rangle = H(t)|u(t)\rangle$$

où H est l'opérateur hamiltonien. On montre alors que, H étant un opérateur hermitique et $|u\rangle$ un vecteur unitaire, c'est-à-dire vérifiant $\langle u|u\rangle = 1$, l'opérateur d'évolution vérifie l'équation :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = H(t)U(t,t_0) \quad (4.2)$$

Comme H est un opérateur hermitique, U est unitaire :

$$U(t,t')U^{+}(t,t')=U^{+}(t,t')U(t,t')=1$$

soit :

$$U^{+}(t,t') = U(t',t) = U^{-1}(t,t') \quad (4.3)$$

où U⁺ est l'opérateur adjoint de U, défini par :

$$< v | U^+ | u > = < u | U | v >^*$$

où « * » désigne le complexe conjugué. H est hermitique H⁺ = H. (4.2) est équivalente à :

$$U(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') U(t',t) dt' \quad (4.4)$$

ou, en utilisant l'hermitique conjugué, compte tenu de (4.3) :

$$U(t,t_{0}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t} U(t,t') H(t') dt' \quad (4.4 \text{bis})$$

En itérant chaque opérateur d'évolution U(t',t₀), U(t',t₁) ..., U(t_{n-1},t_n) ... selon (4.4) on obtient le développement en série suivant, ou série de Dyson, établi en respectant l'ordre chronologique des temps intermédiaires $t_1 < t_2 < t_3 < ... < t_{n-1} < t_n$:

$$U(t,t_{0}) = \mathbf{1} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_{0}}^{t} H(t_{1}) dt_{1} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{2} \int_{t_{0}}^{t} H(t_{1}) dt_{1} \int_{t_{0}}^{t} H(t_{2}) dt_{2} + \dots$$

$$\dots + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n} \int_{t_{0}}^{t} dt_{1} \int_{t_{0}}^{t} dt_{2} \dots \int_{t_{0}}^{t_{n-1}} H(t_{1}) H(t_{2}) \dots H(t_{n}) dt_{n} + \dots$$
(4.5)

Pour un hamiltonien H indépendant du temps, le système est conservatif et la solution générale (4.5) se simplifie considérablement sous la forme :

$$U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H\right) \quad (4.6)$$

De manière générale, dans la description de Schrödinger les opérateurs A qui agissent sur les fonctions d'onde sont indépendants du temps, tandis que les fonctions d'onde $|u(x,t)\rangle$ dépendent du temps. Par exemple, si P(x) est l'opérateur correspondant à la quantité de mouvement p, son équation aux valeurs propres est :

$$P|u_k(x,t)\rangle = -i\hbar\nabla |u_k(x,t)\rangle = p_k|u_k(x,t)\rangle$$

où $|u_k\rangle$ sont les vecteurs propres et p_k les valeurs propres.

Une autre représentation est celle de Heisenberg dans laquelle l'état quantique est fixé $|u(x,t_0)\rangle$ tandis que les opérateurs dépendent du temps. Elle implique que la valeur moyenne d'une grandeur « a » associée à l'opérateur A'(x,t) est obtenue en intégrant toutes les valeurs de A', et non celles de $|u\rangle$, sur le temps :

$$==$$

où l'on a noté : A opérateur indépendant du temps, A' opérateur associé dépendant du temps (les primes désignent la description de Heisenberg), et $|u_a(x,t)\rangle = \langle x|a,t \rangle$ projection sur l'espace des vecteurs propres de A de la fonction d'onde.

Les deux descriptions sont équivalentes puisque l'on a la relation entre les grandeurs (ou observables) de Schrödinger et celles de Heisenberg :

$$A'(t) = U^{+}(t, t_{0}) A U(t, t_{0})$$
 (4.7)

 $\begin{array}{l} \textit{Preuve de (4.7):} \\ \textit{On a, puisque } U^{-1} = U^{+} : |a'\rangle = |a,t_0\rangle = U(t_0,t)|a,t\rangle = U^{+}(t,t_0)|a,t\rangle \quad \textit{donc:} \\ |a,t\rangle = U^{-1}(t_0,t)|a'\rangle = U(t,t_0)|a'\rangle \quad \textit{et } \langle A\rangle = \langle a'|A'(t)|a'\rangle = \langle a'|U^{+}(t,t_0)AU(t,t_0)|a'\rangle \\ \textit{quel que soit } |a'\rangle, \textit{d'où (4.7).} \\ \textit{CQFD de (4.7).} \end{array}$

Après ces rappels, on peut regarder le traitement de la perturbation de l'hamiltonien. L'hamiltonien se décompose en un hamiltonien non perturbé H₀ qui vérifie l'équation de Schrödinger, et en une perturbation H_i :

1

$$H(t) = H_0 + H_i(t)$$

À l'hamiltonien non perturbé H₀ est associé l'opérateur d'évolution donné par (4.6) :

$$U_0(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0\right)$$

solution de :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_0(t,t_0) = H_0U_0(t,t_0) \quad (4.8)$$

qui est donc connue puisque H_0 est supposé connu. Soit $U(t, t_0)$ l'opérateur d'évolution associé à l'hamiltonien total H. La présence de la perturbation H_i , d'opérateur d'évolution U_i , conduit à :

$$U(t,t_0) = U_0(t,t_0)U_i(t,t_0)$$
 (4.9a)

soit, puisque $U_0^{-1} = U_0^+$:

$$U_i(t, t_0) = U_0^+(t, t_0)U(t, t_0)$$
 (4.9b)

qu'il s'agit de déterminer : c'est l'opérateur d'évolution des états dans la description intermédiaire déduite de la description de Schrödinger par la transformation unitaire U_0^+ (t,t₀). En utilisant (4.2) et (21) on a :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = H(t)U(t,t_0) = (H_0 + H_i)U_0U_i = i\hbar\frac{\partial U_0}{\partial t}U_i + i\hbar U_0\frac{\partial U_i}{\partial t}U_i$$

que l'on multiplie à gauche par U_0^+ compte tenu de $U_0^{-1} = U_0^+$:

$$i\hbar U_0^+ \frac{\partial U_0}{\partial t} U_i + i\hbar \frac{\partial U_i}{\partial t} = U_0^+ H_0 U_0 U_i + U_0^+ H_i U_0 U_i$$

En remplaçant $\partial U_0 / \partial t$ par son expression (4.8), on obtient :

$$U_{0}^{+}H_{0}U_{0}U_{i}+i\hbar\frac{\partial U_{i}}{\partial t}=U_{0}^{+}H_{0}U_{0}U_{i}+U_{0}^{+}H_{i}U_{0}U_{i}$$

soit :

$$i\hbar \frac{\partial U_i}{\partial t} = U_0^+ H_i U_0 U_i = H'_i U_i$$
 (4.10)

où H'_i (t, t_0) est l'opérateur hamiltonien transformé de l'hamiltonien perturbé : selon la correspondance (4.7) entre la description de Schrödinger et la description de Heisenberg :

$$H'_{i}(t,t_{0}) = U_{0}^{+}(t,t_{0})H_{i}(t,t_{0})U_{0}(t,t_{0})$$
(4.11)

(4.10) équivaut aussi à :

$$U_{i}(t,t_{0}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t} H'_{i}(t') U_{i}(t',t_{0}) dt' \quad (4.12)$$

La perturbation de l'hamiltonien conduit à faire évoluer un état initial $|a,t_0 > en un état intermédiaire |a',t > au lieu de l'état |a,t > qui serait obtenu par le seul H₀ :$

$$|a',t\rangle = U_i(t,t_0)|a,t_0\rangle$$
 (4.13a)

(4.13a) s'écrit encore, suite à (4.9a) : $|a', t\rangle = U_0^+ U_0 U_i |a, t_0\rangle = U_0^+ U |a, t_0\rangle$ et d'après (4.1) : $|a, t\rangle = U |a, t_0\rangle$ d'où :

$$|a',t>=U_0^+|a,t>$$
 (4.13b)

On détermine de quelle équation l'état intermédiaire |a',t > est-il solution ? On a :

 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|a',t\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(U_i|a,t_0\rangle) = i\hbar\frac{\partial U_i}{\partial t}(|a,t_0\rangle) \text{ puisque } |a,t_0\rangle \text{ ne dépend pas de t.}$ De (4.10) il vient : $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|a',t\rangle = H_i'U_i|a,t_0\rangle$ et de (4.13a) :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|a',t\rangle = H_i'(t,t_0)|a',t\rangle$$
 (4.14)

(4.14) est une équation de Schrödinger pour les états intermédiaires issus de la perturbation de l'hamiltonien.

On détermine la probabilité de transition d'un état intermédiaire $|a'(t_0)>$ en un état intermédiaire |b'(t)>. De manière générale, le postulat n°4 de la mécanique quantique (voir chapitre 5) pose que la probabilité de transition d'un état $|a(t_0)>$ en un état |b(t)> est définie par :

$$P(a \rightarrow b) = |\langle b|U(t,t_0)|a \rangle|^2$$
 (4.15)

Pour l'opérateur d'évolution intermédiaire U_i on admet qu'il est unitaire : les états intermédiaires forment alors un ensemble orthonormal complet de l'espace de Hilbert :

et :

$$< a', t | b', t > = \delta_{a'b'}$$
 (orthogonalité)
 $\sum_{d'} | d', t > < d', t | = 1$ (normalité)

U_i se décompose alors en :

$$U_{i}(t,t_{0}) = \sum_{d'} |d',t\rangle < d',t_{0}| \quad (4.16)$$

Utilisant (4.15), où l'on remplace U par Ui et b et a par b' et a' (états intermédiaires) on a, suite à (4.13a) :

$$P(a'(t_0) \rightarrow b'(t)) = |\langle b', t| U_i(t, t_0) | a', t_0 \rangle|^2 = |\langle b', t| a', t \rangle|^2 \quad (4.17)$$

car (4.16) donne :

$$< b', t | \sum_{d'} | d', t > < d', t_0 | a', t_0 > = < b', t | \sum_{d'} | d', t > \delta_{d'a'} = < b', t | a', t >$$

On a vu jusqu'à présent la transition entre deux états intermédiaires pour un système quantique dont l'hamiltonien est perturbé. En fait, les perturbations, telles qu'elles sont observées, font évoluer un état quantique d'hamiltonien H₀ indépendant du temps vers un état perturbé d'hamiltonien H_i, puis un retour vers un état avec de nouveau l'hamiltonien H₀. On cherche donc la probabilité de transition de l'état initial $|a,t_0 > d$ 'hamiltonien H₀ vers l'état final |b,t > d'hamiltonien perturbé H(t) = H₀ + H_i(t) :

$$P(a \rightarrow b) = |\langle b|U_i(t,t_0)|a \rangle|^2$$

avec la condition initiale sur l'état intermédiaire : $|a', 0\rangle = |a, t_0\rangle$

et sur son état final : $|a', t'\rangle = |b, t\rangle$

Pour la transition intermédiaire on a (4.11), (4.13a), (4.14), et pour les transitions d'hamiltonien H_0 on a (4.6).

Pour la perturbation, $U_i(t,t_0)$ ne s'exprime pas par (4.6) car l'hamiltonien H_i dépend du temps, mais s'exprime par la série de Dyson (4.5). Cependant celle-ci peut s'exprimer au moyen d'une exponentielle via « l'opérateur chronologique » τ dont le rôle est d'ordonner les temps intermédiaires par ordre croissant et de multiplier le terme de rang n par n! qui intervient dans un développement exponentiel classique (voir par exemple [2]) :

$$U_{i}(t,t_{0}) = \tau \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t} H'_{i}(t',t_{0}) dt'\right] \quad (4.18)$$

où H'_i est donné par (4.11). (4.18) montre que les éléments de matrice de l'opérateur U_i, <b|U_i(t,t₀)|a>, dépendent de ceux de H'_i, <b|H'_i(t,t₀)|a>, qu'il faut donc déterminer. (4.11) et (4.6) donnent :

$$< b|H'_{i}(t,t_{0})|a> = < b|U_{0}^{+}(t,t_{0})H_{i}(t)U_{0}(t,t_{0})|a> \\ = < b|\exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_{0})H_{0}\right]H_{i}(t)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_{0})H_{0}\right]|a>$$

Or |a > et |b > sont états propres de l'hamiltonien H₀, de valeurs propres respectives E_a et E_b (énergies) :

$$H_0|b>=E_b|b>$$
 et $H_0|a>=E_a|a>$

L'élément de matrice de H'i devient alors :

$$< b | H'_{i}(t, t_{0}) | a > = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_{0})(E_{b}-E_{a})\right] < b | H_{i}(t) | a >$$

On introduit la « fréquence de Bohr » relative à la transition $a \rightarrow b$:

$$\omega_{ba} = \frac{E_b - E_a}{\hbar} \quad (4.19)$$

et finalement :

$$< b|H'_{i}(t,t_{0})|a> = \exp(i\omega_{ba}(t-t_{0})) < b|H_{i}(t)|a>$$
 (4.20)

On peut ensuite calculer l'élément de matrice de $U_i(t,t_0)$ à différents ordres du développement de l'exponentielle intervenant dans (4.18) :

► Au premier ordre, on a :

$$< b|U_{i}(t,t_{0})|a> \approx < b|U_{i}^{(1)}(t,t_{0})|a> = \frac{1}{i\hbar}\int_{t_{0}}^{t} < b|H'_{i}(t_{1},t_{0})|a> dt_{1}$$

soit :

$$<\!b|U_i^{(1)}(t,t_0)|a\!>=\!\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^t \exp(i\omega_{ba}(t_1-t_0))\!<\!b|H_i(t_1)|a\!>\!dt_1 \quad (4.21)$$

au facteur multiplicatif près $\exp(\frac{i}{\hbar}E_b(t_0-t))$ qui est \approx 1 au premier ordre. De (4.17) et (4.21) il vient la probabilité de transition au 1er ordre :

$$P(a \rightarrow b) = |\langle b|U_{i}(t,t_{0})|a\rangle|^{2} = \frac{1}{\hbar^{2}} |\int_{t_{0}}^{t} \langle b|H_{i}(t')|a\rangle \exp(i\omega_{ba}(t'-t_{0}))dt'|^{2}$$
(4.22)

Le calcul aux ordres plus élevés devient vite laborieux ! On a par exemple : ▶ à l'ordre 2 :

$$< b|U_{i}^{(2)}(t,t_{0})|a> = \frac{1}{(i\hbar)^{2}} \sum_{d} \int_{t_{0}}^{t} dt_{1} \int_{t_{0}}^{t_{1}} dt_{2} e^{-iE_{b}(t-t_{1})/\hbar} < b|H_{i}(t_{1})|d>$$

$$\times e^{-iE_{d}(t_{1}-t_{2})/\hbar} < d|H_{i}(t_{2})|a> e^{-iE_{a}(t_{2}-t_{0})/\hbar}$$

$$(4.21bis)$$

▶ à l'ordre 3 :

$$< b|U_{i}^{(3)}(t,t_{0})|a> = \frac{1}{(i\hbar)^{3}} \sum_{d} \sum_{c} \int_{t_{0}}^{t} dt_{1} \int_{t_{0}}^{t_{1}} dt_{2} \int_{t_{0}}^{t_{2}} dt_{3} e^{-iE_{b}(t-t_{1})/\hbar} < b|H_{i}(t_{1})|d>$$

$$\times e^{-iE_{d}(t_{1}-t_{2})/\hbar} < d|H_{i}(t_{2})|c> e^{-iE_{c}(t_{2}-t_{3})/\hbar} < c|H_{i}(t_{3})|a> e^{-iE_{a}(t_{3}-t_{0})/\hbar}$$

$$(4.21ter)$$

les sommations portent sur tous les vecteurs de la base de l'espace de Hilbert engendré par H₀.

▶ à l'ordre n : En développant U_i(t,t₀) suivant la série de Dyson (4.5) on obtient :

$$U_i(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} U_i^{(n)}(t, t_0)$$
 (4.23a)

où $U_i^{(n)}$ est le terme du développement de $U_i(t,t_0)$ au rang n :

$$U_{i}^{(n)}(t,t_{0}) = \frac{1}{(i\hbar)^{n}} \int_{t>t_{n}>t_{n-1}>...>t_{1}>t_{0}} dt_{n} dt_{n-1}...dt_{1}H_{i}(t_{n})H_{i}(t_{n-1})...H_{i}(t_{1})$$
(4.23b)

Compte tenu de (4.9b) et (4.11), (35) donne pour l'opérateur d'évolution global :

$$U(t,t_0) = U^{(0)}(t,t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t,t_0) \quad (4.24a)$$

où $U^{(n)}$ est le terme du développement de $U(t,t_0)$ au rang n :

$$U^{(n)}(t,t_{0}) = \frac{1}{(i\hbar)^{n}} \int_{t>t_{n}>t_{n-1}>\dots>t_{1}>t_{0}} dt_{n} dt_{n-1} \dots dt_{1} U^{(0)}(t,t_{n}) H_{i}(t_{n}) U^{(0)}(t_{n},t_{n-1}) H_{i}(t_{n-1}) \\ \dots U^{(0)}(t_{2},t_{1}) H_{i}(t_{1}) U^{(0)}(t_{1},t_{0})$$
(4.24b)

Les éléments de matrice de U(t, t_0) qui interviennent dans la probabilité de transition (4.15) sont donc, suite à (4.24a et b) :

$$< b|U(t,t_0)|a> = \sum_{n=1}^{\infty} < b|U^{(n)}(t,t_0)|a>$$
 (4.25)

©Frédéric Élie – <u>http://fred.elie.free.fr</u>, avril 2021

où $U^{(0)}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0\right)$ (relation (4.6)), et où l'ordre n de U(t,t_0), U^{(n)}(t,t_0) est celui de U_i(t,t_0), U_i^{(n)}(t,t_0) : U^{(n)}(t,t_0) = U_i^{(n)}(t,t_0), donné par (4.24b)

4.3 - Diagrammes de Feynman et états virtuels

Les diagrammes de Feynman permettent de calculer jusqu'à un ordre n les éléments de matrice $< b|U_i(t,t_0)|a>$. De (4.23a) et (4.23b) ces éléments de matrices sont :

$$< b|U_{i}(t,t_{0})|a> = < b|a> + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_{0}}^{t} dt_{1} \exp(-i\frac{E_{b}}{\hbar}(t-t_{1})) < b|H_{i}(t_{1})|a> \exp(-i\frac{E_{a}}{\hbar}(t_{1}-t_{0}))$$

$$+ ... + \frac{1}{(i\hbar)^{n}} \sum_{a_{k}} \int_{t_{0}}^{t} dt_{1} \int_{t_{0}}^{t_{1}} dt_{2} ... \int_{t_{0}}^{t_{n-1}} dt_{n} \exp(-i\frac{E_{b}}{\hbar}(t-t_{1})) < b|H_{i}(t_{1})|a_{1}> \times$$

$$\times \exp(-i\frac{E_{a_{1}}}{\hbar}(t_{1}-t_{2})) < a_{1}|H_{i}(t_{2})|a_{2}> \exp(-i\frac{E_{a_{2}}}{\hbar}(t_{2}-t_{3})) ... \exp(-i\frac{E_{a}}{\hbar}(t_{n}-t_{0}))$$

$$(4.26)$$

On peut représenter par les diagrammes de Feynman les contributions des ordres successifs, de la manière suivante (figure 3) :

Le temps suivant lequel ont lieu les évolutions est porté sur l'axe vertical ; sur l'axe horizontal on porte les différents ordres n de contribution successifs. À l'ordre n, chaque interaction intermédiaire k, aux temps t_k , est représentée par un point appelé vertex, situé entre 2 lignes d'évolution consécutives : ce point décrit un état intermédiaire, encore appelé « état virtuel » au-delà de l'ordre 1 (ceci par opposition aux états initial et final |a > et |b > qui sont considérés réels).

Avant d'expliciter la règle quantitative des diagrammes de Feynman, traitons de manière qualitative l'exemple des 3 premiers ordres (éq. (4.21)).



figure 3 : Diagrammes de Feynman représentant les contributions d'ordre successif n = 1, 2, 3 … à l'amplitude de probabilité P (a → b) de transition de l'état |a > à |b >. Les traits rectilignes donnent l'évolution des états dans le temps, et les flèches ondulées indiquent l'action de l'hamiltonien perturbé aux différentes dates intermédiaires.

▶ Pour n = 1, il est intéressant de réécrire (4.21) pour faire apparaître la succession de l'état initial $|a \rangle$, la perturbation due à H_i(t₁), et l'état final $|b \rangle$, de droite à gauche :

$$<\!b|U_i^{(1)}(t,t_0)|a\!>=\!\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^t dt_1 \exp(-i\frac{E_b}{\hbar}(t-t_1))\!<\!b|H_i(t_1)|a\!>\exp(-i\frac{E_a}{\hbar}(t_1-t_0)) \quad (4.27)$$

De t_0 à t_1 : l'évolution est décrite seulement par l'hamiltonien non perturbé H_0 , le système demeure dans l'état |a > et l'évolution se traduit par la multiplication de la fonction d'onde |a > par exp(-iE_a(t₁-t₀)/ \hbar) :

$$|a, t_1>=|a, t_0>\exp(-i\frac{E_a}{\hbar}(t_1-t_0))$$

À l'instant t₁ la perturbation H_i(t₁) fait passer le système de l'état |a > a l'état |b >, transition représentée par l'élément de matrice $\langle b|H_i(t_1)|a \rangle$.

De t_1 à t : l'évolution est de nouveau seulement décrite par l'hamiltonien non perturbé H_0 , le système demeure dans l'état |b > et cette évolution se traduit par :

$$|b,t>=|b,t_{1}>\exp(-i\frac{E_{b}}{\hbar}(t-t_{1}))$$

Ainsi, en suivant le diagramme de t_0 à t, on rencontre les 3 évolutions dans leur ordre successif de droite à gauche dans l'expression (4.27).

La contribution de l'ordre n = 1 à la probabilité de transition $P(a \rightarrow b)$ s'obtient en intégrant l'ensemble de ces évolutions sur $t_0 \le t_1 \le t$.

Ce principe de parcours des évolutions à l'ordre n = 1 est reconduit aux ordres supérieurs, avec des transitions intermédiaires supplémentaires.

▶ Pour n = 2, de t_0 à t_2 l'évolution est seulement décrite par l'hamiltonien non perturbé H_0 , le système demeure dans l'état |a > et l'évolution de la fonction d'onde se traduit par :

$$|a, t_2>=|a, t_0>\exp(-i\frac{E_a}{\hbar}(t_2-t_0))$$

À l'instant t_2 , la perturbation $H_i(t_2)$ fait passer le système de l'état |a > à l'état intermédiaire |d >. De t_2 à t_1 le système évolue avec seulement l'hamiltonien non perturbé H_0 et demeure dans l'état |d > :

$$|d,t_1>=|d,t_2>\exp(-i\frac{E_d}{\hbar}(t_1-t_2))$$

À l'instant t_1 , la perturbation $H_i(t_1)$ fait passer le système de l'état |d > a l'état final |b >. De t_1 à t le système évolue avec de nouveau seulement l'hamiltonien non perturbé H_0 et demeure dans l'état |b > :

$$|b,t>=|b,t_1>\exp(-i\frac{E_b}{\hbar}(t-t_1))$$

La contribution de l'ordre n = 2 à la probabilité de transition $P(a \rightarrow b)$ s'obtient en intégrant l'ensemble de ces évolutions sur t_2 et t_1 , avec $t_0 < t_2 < t_1 < t$ et sur tous les états intermédiaires $|d \rangle$. ceux-ci sont qualifiés d'états virtuels au sens où ils ne sont pas les états initiaux et finaux observables.

▶ Pour n = 3, en appliquant le même raisonnement à partir de (4.21ter), les transitions font passer le système par 2 états virtuels $|d \rangle$ et $|c \rangle$, l'hamiltonien perturbateur intervenant 3 fois : H_i(t₃), H_i(t₂), H_i(t₁). Au total le système parcourt les états suivants : $|a \rangle$ de t₀ à t₃ sous l'action de H₀, $|c \rangle$ en t₃ sous l'action de H_i(t₃), $|c \rangle$ de t₃ à t₂ sous l'action de H₀, $|d \rangle$ en t₂ sous l'action de H_i(t₂), $|d \rangle$ de t₂ à t₁ sous l'action de H₀, $|b \rangle$ en t₁ sous l'action de H_i(t₁), $|b \rangle$ de t₁ à t sous l'action de H₀. La contribution à P(a → b) s'obtient en intégrant sur t₃, t₂, t₁ et en sommant sur tous les états $|d \rangle$ et $|c \rangle$.

▶ Pour n quelconque, les transitions s'effectuent par (n – 1) états virtuels. D'après (4.25) la probabilité de transition de |a > à |b > est, à cet ordre :

$$P(a \rightarrow b) = |\langle b| U_{i}(t, t_{0}) | a \rangle|^{2} \approx |\langle b| U_{i}^{(1)}(t, t_{0}) | a \rangle + \langle b| U_{i}^{(2)}(t, t_{0}) | a \rangle + \dots + \langle b| U_{i}^{(n)}(t, t_{0}) | a \rangle|^{2}$$

$$(4.28)$$

Remarque : On n'a pas $P(a \rightarrow b) = P(b \rightarrow a)$, sauf si l'hamiltonien perturbé se conserve par renversement du temps : H_i (-t) = H_i (t) (micro-réversibilité). Cependant l'égalité est satisfaite en première approximation pour l'ordre n = 1.

On peut se demander alors si la question de la flèche du temps fait-elle intervenir les états virtuels ?

Détaillons maintenant les règles quantitatives des diagrammes de Feynman (v. [2]).

Sur la figure 3, chaque bande associée à un état repéré par k, comprise entre les temps t_{j+1} et t_j , correspond à une évolution avec le seul hamiltonien non perturbé H_0 de valeur propre E_k :

$$\begin{array}{c|c} U_k(t_j, t_{j+1}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t_j - t_{j+1})\right) & \text{ si } t_j > t_{j+1} \\ = 0 & \text{ si } t_j < t_{j+1} \end{array}$$
(4.29)

puisque par construction $t_0 < t_n < t_{n-1} < ... < t_{j+1} < t_j < ... < t_1 < t$. Chaque vertex correspond à une transition due à la perturbation H_i (t_j) qui se produit en t_j, et dont la contribution est :

$$\frac{1}{i\hbar} < a_{k+1} | H_i(t_j) | a_k >$$
 (4.30)

Comme l'indique (4.26) la contribution à P(a \rightarrow b) s'obtient en intégrant sur tous les temps intermédiaires t_j, et sur tous les états intermédiaires a_k.

Pour inclure les bornes d'intégration à l'infini, en vue d'une transformation de Fourier, on redéfinit l'opérateur d'évolution de la transition a \rightarrow b par :

$$\begin{array}{c} U'(t,t_0) = U_i(t,t_0) & \text{si } t > t_0 \\ = 0 & \text{si } t < t_0 \end{array}$$

Avec ces conditions, (4.26) devient :

$$< b|U'(t,t_0)|a> = < b|a> + \frac{1}{i\hbar} \int dt_1 U_b(t,t_1) < b|H_i(t_1)|a> U_a(t_1,t_0) + \dots$$

$$... + \frac{1}{(i\hbar)^n} \int dt_1 \dots \int dt_n U_b(t,t_1) < b|H_i(t_1)|a_1> \dots < a_{n-1}|H_i(t_n)|a> U_a(t_n,t_0)$$
(4.30bis)

On exprime U'(t, t_0) et U_k (t_j, t_{j+1}) au moyen de leurs transformées de Fourier :

$$U'(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} U'(t, t_0) \exp(i\omega t) dt$$
$$U_k(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} U_k(t) \exp(i\omega t) dt = \frac{i\hbar}{\hbar\omega - E_k + i\eta} \text{ suite à (4.29), où } \eta \to 0.$$

(Noter que les transformées de Fourier U'(ω) et U_k(ω) ont la dimension d'un temps puisque les opérateurs d'évolution sont a-dimensionnels). On a alors :

$$U'(t,t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} U'(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega$$
$$U_k(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} U_k(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega$$

que l'on remplace dans la série (4.30bis), ce qui donne :

$$\begin{aligned} &\frac{1}{i\hbar} < b | U'(\omega) | a > = \frac{1}{\hbar\omega - E_a + i\eta} < b | a > + \frac{1}{\hbar\omega - E_b + i\eta} < b | H_i | a > \frac{1}{\hbar\omega - E_a + i\eta} + \\ &+ \sum_k \frac{1}{\hbar\omega - E_b + i\eta} < b | H_i | a_k > \frac{1}{\hbar\omega - E_k + i\eta} < a_k | H_i | a > \frac{1}{\hbar\omega - E_a + i\eta} + \dots \end{aligned}$$

Dans cette expression on applique le fait que les $|a \rangle$, $|b \rangle$, $|a_k \rangle$ sont vecteurs propres de H avec les valeurs propres E_a , E_b , E_k , ce qui donne après simplification la relation entre opérateurs :

$$\frac{1}{i\hbar}U'(\omega) = \frac{1}{\hbar\omega - H_0 + i\eta} + \frac{1}{\hbar\omega - H_0 + i\eta}H_i\frac{1}{\hbar\omega - H_0 + i\eta} + \dots$$

Comme H = H_0 + H_i , on montre que l'expression ci-dessus est égale à :

$$\frac{1}{i\hbar}U'(\omega) = \frac{1}{\hbar\omega - H + i\eta} \quad (4.31)$$

La relation (4.31) s'interprète comme suit : dans le diagramme de Feynman (figure 3) chaque bande comprise entre deux vertex représente l'évolution de l'état quantique sous l'action du seul hamiltonien non perturbé H = H₀, soit $\frac{1}{\hbar\omega - H_0 + i\eta}$, et les vertex représentent l'opérateur H_i = H - H₀ perturbation de l'hamiltonien.

4.4 - Opérateurs de création et d'annihilation (6)

Soit un champ scalaire réel d'amplitude Φ (**r**,t) en chaque point **r** de l'espace et à chaque instant t. C'est un système à une infinité de degrés de liberté vérifiant une équation d'évolution de la forme :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2}(\mathbf{r},t) = f\left(\Phi(\mathbf{r},t), \frac{\partial \Phi}{\partial t}(\mathbf{r},t)\right)$$

avec la condition initiale : $\left(\frac{\partial \Phi}{\partial t}(\mathbf{r}, t)\right)_{t=t_0}$

On montre, pour un champ scalaire, que la fonctionnelle f la plus simple qui laisse l'équation invariante par les transformations de Lorentz donne l'équation de Klein-Gordon :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 \Phi - \mu^2 \Phi$$

soit encore :

$$(\Box^2 + \frac{\mu^2}{c^2})\Phi = 0$$
 (4.32)

où $\Box = (\nabla, \partial/ic\partial t)$ est le quadrivecteur gradient d'espace-temps, son carré $\Box^2 = (\nabla^2 - \partial^2/c^2\partial^2 t)$ est le d'alembertien, où ∇^2 est le laplacien, et :

$$\mu = \frac{mc^2}{\hbar}$$

où m est la masse au repos des particules associées au champ quantifié ; μ a la dimension de l'inverse d'un temps [T⁻¹]. D'ailleurs (4.32) est la transposition, avec les opérateurs quantiques, de l'équation d'énergie d'Einstein :

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

⁶ Voir par exemple [3].

avec les correspondances : E \rightarrow i $\hbar \partial/\partial t$ pour l'énergie, et p \rightarrow i $\hbar \nabla$ pour la quantité de mouvement p. Dans (4.32) le terme $\nabla^2 \Phi$ a pour effet de coupler les unes aux autres les coordonnées, ou degrés de liberté, du système, qui sont des oscillations de fréquence μ . On peut ramener la dynamique du système à des coordonnées, dites normalisées, q_k(t) associées à des oscillateurs mutuellement indépendants. Soient f_k les fonctions propres de (- ∇^2) et w_k² les valeurs propres associées :

$$-\nabla^2 f_k = w_k^2 f_k$$

Le système est dit de dimension p si k = 1, 2, ..., p. Les (f_k) forment une suite orthonormale complète de fonctions réelles :

$$< f_{k} | f_{m} >= \int f_{k}^{*}(\mathbf{r}) f_{m}(\mathbf{r}) d^{3}\mathbf{r} = \int f_{k}(\mathbf{r}) f_{m}(\mathbf{r}) d^{3}\mathbf{r} = \delta_{km}$$
$$\sum_{k=1}^{p} f_{k}(\mathbf{r}) f_{k}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

Il s'ensuit que la solution Φ (**r**,t) de (4.32) se développe suivant :

et:

$$\Phi(\mathbf{r},t) = \sum_{k=1}^{p} q_{k}(t) f_{k}(\mathbf{r})$$
avec: $q_{k}(t) = \int f_{k}(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r},t) d^{3}\mathbf{r}$

$$(4.33)$$

De (4.33) et (4.32) les q_k vérifient l'équation de l'oscillateur harmonique :

$$\begin{array}{c} q_{k}''(t) + \omega_{k}^{2} q_{k}(t) = 0 \\ \text{avec:} \quad \omega_{k} = \sqrt{c^{2} w_{k}^{2} + \mu^{2}} \end{array}$$
(4.34)

où l'on a noté q_k" (t) = d²q_k(t)/dt², ω_k est la pulsation propre du degré de liberté n°k. Si les degrés de liberté sont spatialement homogènes, les valeurs propres de (- ∇^2) sont supposées dégénérées $w_k^2 = w^2$ et donc les pulsations identiques $\omega_k = \omega = \sqrt{c^2 w^2 + \mu^2}$; hypothèse simplificatrice qui suffit ici pour introduire les opérateurs création et annihilation, et l'énergie de l'état zéro (ou du vide). (4.33) montre que l'amplitude du champ est une superposition linéaire des oscillateurs indépendants. Pour chaque degré de liberté n°k l'hamiltonien H_k est :

$$H_{k} = \frac{p_{k}^{2}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^{2}q_{k}^{2} \quad (4.35a)$$

où $p_k = m dq_k / dt$ est la quantité de mouvement. L'hamiltonien total est la somme des hamiltoniens des degrés de liberté :

$$H = \sum_{k=1}^{p} H_{k}$$
 (4.35b)

En physique quantique on remplace les variables dynamiques q_k , p_k par leurs opérateurs (les observables) qui doivent vérifier les relations de commutation :

$$\left[q_{k}, p_{m}\right] = i\hbar\delta_{km}$$

On introduit les opérateurs sans dimension suivants :

création de quanta des oscillateurs:
$$b_k^+ = \sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}} (\omega q_k - i\frac{p_k}{m})$$

annihilation de quanta des oscillateurs: $b_k = \sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}} (\omega q_k + i\frac{p_k}{m})$ (4.36a)

Ces appellations seront justifiées plus loin.

 b_{k}^{+} est le conjugué de b_{k} , donc : $(b_{k}^{+})^{+} = b_{k}^{-}$. b_{k}^{+} et b_{k} ne sont pas des opérateurs hermitiques donc ce ne sont pas des observables. Ils vérifient la relation de commutation :

$$\left[b_{k}, b_{m}^{+}\right] = \delta_{km} \quad (4.36b)$$

L'opérateur nombre de quanta dans les états du degré de liberté (k) est :

$$N_k = b_k^+ b_k^-$$
 (4.37)

Compte tenu de (4.36a et b), (4.37) devient : $N_k = \frac{m\omega}{2\hbar} q_k^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega} p_k^2 + \frac{i}{2\hbar} [q_k, p_k]$

Comme $[q_k, p_k] = q_k p_k - p_k q_k = i\hbar \mathbf{1}$, il vient : $N_k = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{1}{2}m\omega^2 q_k^2 + \frac{p_k^2}{2m}\right) - \frac{1}{2}\mathbf{1}$; or l'hamiltonien

de (k) est, d'après (4.35a): $H_k = \frac{1}{2} \left(m \omega^2 q_k^2 + \frac{p_k^2}{m} \right)$ d'où: $N_k = \frac{H_k}{\hbar \omega} - \frac{1}{2}\mathbf{1}$. On obtient ainsi l'expres-

sion de l'hamiltonien du degré de liberté (k) en fonction du nombre de quanta de cette dimension :

$$H_k = \left(N_k + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (4.38)$$

avec N_k (ses valeurs propres) = 0, 1, 2 ... ∞ . (4.38) montre que les valeurs propres de l'hamiltonien sont directement reliées aux valeurs propres de l'opérateur nombre de quanta. Soient n_k les valeurs propres de N_k et |n_k > ses vecteurs propres :

$$N_k |n_k^{>} = n_k^{|} |n_k^{>}$$
 (4.39)

Les valeurs propres n_k sont réelles puisque N_k est un opérateur hermitique : $N_k^+ = N_k^-$, donc :

$$n_k = n_k^* = \langle n_k | N_k | n_k \rangle = \langle n_k | b_k^+ b_k | n_k \rangle = ||b_k| | n_k \rangle ||^2 \ge 0$$

Les valeurs propres n_k de N_k sont donc positives ou nulles, et si elles sont nulles alors les vecteurs propres correspondants sont nuls.

De (4.33) et (4.36a et b) on obtient l'expression du champ en fonction des opérateurs création et annihilation :

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2 m \omega}} \sum_{k=1}^{p} (b_k^+ + b_k) f_k$$
 (4.40)

L'ensemble des états propres de l'hamiltonien total H est le produit tensoriel des états propres des H_k. Soit l'espace (\mathbf{E}_k) dans lequel l'hamiltonien H_k est défini avec les variables dynamiques q_k et p_k. L'espace de tous les états dynamiques, d'hamiltonien H, est le produit tensoriel (\mathbf{E}) = $\mathbf{E}_1 \otimes \mathbf{E}_2 \otimes ... \otimes \mathbf{E}_p$, le vecteur de cet espace $|n_1...n_p \rangle = |n_1 \rangle ... |n_p \rangle$ est le vecteur propre de l'hamiltonien total :

$$\begin{split} H|n_{1}...n_{p} &>= \sum_{k=1}^{p} H_{k}|n_{1}...n_{p} >= \sum_{k=1}^{p} H_{k}|n_{1} > ...|n_{k} > ...|n_{p} > \\ \text{Or}: \quad H_{k}|n_{k} > = \left(N_{k} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n_{k} > = \hbar\omega N_{k}|n_{k} > + \frac{1}{2}\hbar\omega|n_{k} > = \hbar\omega n_{k}|n_{k} > + \frac{1}{2}\hbar\omega|n_{k} > \text{ soit}: \\ H_{k}|n_{k} > = \left(n_{k} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n_{k} > \quad \text{(4.41)} \end{split}$$

 $D'où: \quad H|n_1...n_p>=(H_1|n_1>)...|n_p>+|n_1>(H_2|n_2>)...|n_p>+...+|n_1>...(H_p|n_p>) \quad \text{devient en utilisant (4.41):}$

$$\begin{split} H \mid & n_1 \dots n_p > = \left((n_1 + \frac{1}{2}) \hbar \omega \mid n_1 > \right) \dots \mid n_p > + |n_1 > \left((n_2 + \frac{1}{2}) \hbar \omega \mid n_2 > \right) \dots \mid n_p > + \dots + |n_1 > \dots \left((n_p + \frac{1}{2}) \hbar \omega \mid n_p > \right) \\ = \left((n_1 + n_2 + \dots + n_p) + \frac{p}{2} \right) \hbar \omega \mid n_1 > \dots \mid n_p > \end{split}$$

et posant :

$$n = n_1 + \dots + n_p$$
 (4.42a)

il vient :

$$H|n_1...n_p > = (n + \frac{p}{2})\hbar\omega|n_1...n_p >$$
 (4.42b)

La valeur propre de (4.42b) est l'énergie du système distribuée sur p degrés de liberté de populations quanta $n_1, ..., n_p$:

$$E_n = (n + \frac{p}{2})\hbar\omega \quad (4.43)$$

Cette énergie dépend uniquement de n donné par (4.42a). Ces valeurs propres peuvent prendre un nombre de valeurs distinctes égal à :

$$C_{n+p-1}^{n} = \frac{(n+p-1)!}{n!(p-1)!}$$
 (4.44)

donc chaque valeur propre E_n de H a une dégénérescence de C_{n+p-1}^n .

Les degrés de liberté dont toutes les populations de quanta sont nulles correspondent au vide quantique, ou état zéro, on note son vecteur comme suit :

$$n_1 = n_2 = ... = n_p = 0 \rightarrow |0\rangle = |0|... 0 > avec donc b_k|0\rangle = |0\rangle, 1 \le k \le p$$

(p fois)

Montrons que les vecteurs propres $|n_1 \dots n_p > de H$ se déduisent de |0 > par le produit :

$$|n_1 \dots n_p\rangle = \prod_{k=1}^{p} \frac{(b_k^+)^{n_k}}{\sqrt{n_k!}} |0\rangle = \frac{(b_1^+)^{n_1} \dots (b_p^+)^{n_p}}{\sqrt{n_1! \dots n_p!}} |0\rangle \quad (4.45)$$

Preuve de (4.45) :

De la relation de commutation $[b_k, b_k^+]=1$ on a : $N_k b_k = (b_k^+ b_k) b_k = (b_k b_k^+ - 1) b_k = b_k (N_k - 1)$ soit :

$$\begin{bmatrix} N_k, b_k \end{bmatrix} = -b_k \quad (4.46a)$$

sommaire - page 36/75
de même :

$$\left[N_{k}, b_{k}^{+}\right] = b_{k}^{+} \quad (4.46b)$$

(4.46a) donne l'équation pour $|n_k >$: $N_k b_k | n_k > = b_k (N_k - 1) | n_k >$. Or d'après (4.39): $N_k | n_k > = n_k | n_k >$ d'où : $N_k (b_k | n_k >) = (n_k - 1) (b_k | n_k >)$; le vecteur $b_k | n_k >$ est donc vecteur propre de N_k avec la valeur propre (n_k - 1). Ceci implique que $b_k | n_k >$ est proportionnel au vecteur $|n_k - 1 >$ associé à cette valeur propre :

$$b_k | n_k > = c_k | n_k - 1 >$$

Les vecteurs propres forment un système orthonormal : $< n_k | n_m > = \delta_{km}$. La norme de $b_k | n_k > est$ alors :

$$< n_{k} | b_{k}^{+} b_{k} | n_{k} > = < n_{k} - 1 | c_{k}^{*} c_{k} | n_{k} - 1 > = | c_{k} |^{2} < n_{k} - 1 | n_{k} - 1 > = | c_{k} |^{2} = || b_{k} | n_{k} > ||^{2} = n_{k}$$

$$c_{k} = \sqrt{n_{k}}$$

soit :

d'où :

$$b_k | n_k > = \sqrt{n_k} | n_k - 1 >$$
 (4.47)

L'opérateur annihilation b_k transforme donc la valeur propre n_k de N_k en la valeur propre $\sqrt{n_k}$ associée au vecteur propre |n_k –1 > de N_k.

On montre de la même manière que le vecteur $b_k^2 |n_k > est$ aussi un vecteur propre de N_k mais avec comme valeur propre ($n_k - 2$), et ainsi de suite jusqu'à l'ordre p :

$$\begin{array}{c|c} b_{k} |n_{k} \geq = \sqrt{n_{k}} |n_{k} - 1 > \\ b_{k}^{2} |n_{k} \geq = b_{k} (b_{k} |n_{k} >) = b_{k} \sqrt{n_{k}} |n_{k} - 1 > = \sqrt{n_{k} (n_{k} - 1)} |n_{k} - 2 > \\ & & \\ b_{k}^{p} |n_{k} \geq = \sqrt{n_{k} (n_{k} - 1) \dots (n_{k} - p + 1)} |n_{k} - p > \end{array}$$

$$(4.48)$$

Pour $n_k = 0$, on a vu que $b_k | n_k > = 0$:

$$b_k | 0 > = 0$$
 (4.49)

Donc $n_k = 0$ appartient à la suite des valeurs propres de N_k qui, comme vu plus haut, diffèrent par un écart égal à 1 pour 2 états consécutifs, donc les valeurs propres n_k sont des entiers positifs ou nuls :

Pour b_{k}^{+} le même type de raisonnement s'applique en utilisant (4.46b) et on montre pour l'opérateur création une relation analogue à (4.47) :

$$b_k^+ |n_k^+\rangle = \sqrt{n_k^+ 1} |n_k^+\rangle$$
 (4.50)

Puisque les n_k sont des entiers, on déduit de (4.38) et (4.39) que les valeurs propres E_k de l'hamiltonien H_k sont discrètes : $H_k |n_k \ge = (n_k + \frac{1}{2})\hbar\omega |n_k \ge = E_k |n_k \ge$, soit :

$$E_k = (n_k + \frac{1}{2})\hbar\omega$$
 (4.51)

Les énergies des oscillations forment une suite discrète.

De (4.50) il s'ensuit qu'à partir d'un vecteur propre $|n_k > de N_k$ on peut obtenir les autres vecteurs propres

en itérant l'action de b⁺ (ou de b). Si l'on choisit l'état du vide quantique |0 >, cela donne la suite :

$$\begin{split} |0>=|0> \\ |n_{1}>=|1>=b_{1}^{+}|0> \\ |n_{2}>=|2>=\frac{1}{\sqrt{2}}(b_{2}^{+})^{2}|0> \\ & \\ & \\ |n_{p}>=|p>=\frac{1}{\sqrt{n_{p}!}}(b_{p}^{+})^{n_{p}}|0> \end{split}$$

c'est-à-dire :

$$|n_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_k!}} (b_k^+)^{n_k} |0\rangle$$
, $1 \le k \le p$

Les états propres de l'hamiltonien total H sont le produit tensoriel des états |nk >, ce qui donne :

$$|n_1 \dots n_k \dots n_p\rangle = |n_1\rangle \dots |n_k\rangle \dots |n_p\rangle = b_1^+ \frac{(b_2^+)^2}{\sqrt{2}} \dots \frac{(b_k^+)^{n_k}}{\sqrt{n_k!}} \dots \frac{(b_p^+)^{n_p}}{\sqrt{n_p!}}|0\rangle$$

qui est (4.45). *CQFD de (4.45*).

Les vecteurs propres de N_k forment une base complète pour la représentation des oscillateurs en présence du champ, dont les quanta d'énergie sont donnés par (4.51) : l'espace engendré par cette base est appelé espace de Fock.

L'application de b_k au vecteur propre $|n_1 \dots n_p >$ de l'hamiltonien total H donne, d'après (4.47) :

$$b_k | n_1 \dots n_p \rangle = b_k | n_1 \rangle \dots | n_k \rangle \dots | n_p \rangle = | n_1 \rangle \dots \sqrt{n_k} | n_k - 1 \rangle \dots | n_p \rangle$$

soit :

$$b_k | n_1 \dots n_p > = \sqrt{n_k} | n_1 \dots (n_k - 1) \dots n_p >$$
 (4.52)

L'égalité (4.52) montre que l'opérateur b_k supprime une particule de l'état quantique $|n_k \rangle$, et donc de l'ensemble des particules du système d'hamiltonien H :

$$n \rightarrow n - 1 = n_1 + n_2 + ... + (n_k - 1) + ... + n_p$$

Cela justifie pour b_k l'appellation « opérateur annihilation ». De même l'application b_k^+ à $|n_1 \dots n_p >$ donne, d'après (4.50) :

$$b_k^+ |n_1 \dots n_p\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_1 \dots (n_k + 1) \dots n_p\rangle$$
 (4.53)

L'égalité (4.53) montre que b_k^+ ajoute une particule à l'état quantique $|n_k >$ et donc à l'ensemble des particules du système d'hamiltonien H :

$$n \rightarrow n + 1 = n_1 + n_2 + ... + (n_k + 1) + ... + n_p$$

ce qui justifie pour b_k^+ l'appellation « opérateur création ».

De (4.37) et de (4.52) et (4.53) on déduit que l'opérateur nombre de particules de l'état n°k a pour équation aux valeurs propres :

$$N_{k}|n_{1}...n_{k}...n_{p}\rangle = b_{k}^{+}b_{k}|n_{1}...n_{k}...n_{p}\rangle = n_{k}|n_{1}...n_{k}...n_{p}\rangle$$
(4.54)

puisque l'on a : $b_k | n_1 ... n_k ... n_p > = \sqrt{n_k} | n_1 ... n'_k ... n_p >$ avec $n_k ' = n_k - 1$, puis :

$$b_k^+ b_k | n_1 \dots n_k \dots n_p > = \sqrt{n_k' + 1} \sqrt{n_k} | n_1 \dots (n_k' + 1) \dots n_p > = \sqrt{n_k - 1 + 1} \sqrt{n_k} | n_1 \dots (n_k - 1 + 1) \dots n_p > = n_k | n_1 \dots n_k \dots n_p >$$

De (4.43) et (4.51) il découle que, pour l'état du vide quantique, $n_k = 0$ pour tout k, donc n = 0, l'énergie n'est pas nulle mais égale au quantum :

$$E_0 \!=\! \frac{1}{2} \hbar \omega$$

Le vide quantique est un état d'énergie minimale pour lequel le champ est nul en tout point $\Phi_0(\mathbf{r}) = 0$. Pour les autres états (champ quantifié), $\Phi(\mathbf{r})$ exprimé par (4.40), est un opérateur qui ne commute pas avec H, comme on le constate par les développements utilisant (4.40), (4.35b), (4.36b) dans [$\Phi(\mathbf{r})$,H]. La valeur moyenne du champ quantifié relativement à l'état du vide est nulle :

$$<0|\Phi(\mathbf{r})|0>=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sum_{k}<0|b_{k}^{+}+b_{k}|0>f_{k}=0$$

Par contre l'écart quadratique du champ quantifié relativement au vide quantique est non nul :

$$<\Phi^{2}(\mathbf{r})>_{0} = \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_{k} \sum_{k'} <0 |(b_{k}^{+}+b_{k})(b_{k'}^{+}+b_{k'})|0>f_{k}(\mathbf{r})f_{k'}(\mathbf{r})$$
$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_{k} \sum_{k'} <0 |b_{k}b_{k'}^{+}|0>f_{k}(\mathbf{r})f_{k'}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_{k} \sum_{k'} \delta_{kk'}f_{k}f_{k'},$$
$$<\Phi^{2}(\mathbf{r})>_{0} = \sum_{k} \frac{\hbar}{2m\omega} f_{k}^{2}(\mathbf{r}) >0 \quad (4.55)$$

soit :

Remarque : bosons et fermions :

On a vu que l'état dynamique du système total soumis à un champ scalaire est complètement décrit par les nombres entiers $n_1, n_2, ..., n_p$ de ces particules occupant les états individuels des dimensions, ou degrés de liberté, fixées par les $f_1, f_2, ..., f_p$.

Ces nombres d'occupation peuvent être infinis ($n_p \rightarrow \infty$). Les particules sont alors indiscernables, et suivent donc la statistique de Bose-Einstein : ce sont les bosons (exemple : photons).

À l'inverse, les particules discernables, c'est-à-dire pour lesquelles les fonctions d'onde suivent le principe d'exclusion de Pauli :

 $|\psi(r_1, r_2)>=-|\psi(r_2, r_1)>$

suivent la statistique de Fermi-Dirac : ce sont les fermions (exemple : électrons).

Le tableau 2 donne l'exemple de l'oscillateur à p = 2 degrés de liberté, en utilisant (4.42b) :

n ₁	n ₂	vecteurs propres de N ₁ et N ₂ : $ n_1n_2 >$	$n = n_1 + n_2$	n + p/2 (p = 2)	valeurs propres de H : E _n (4.43)	dégénérescence (4.44)
0	0	00 > (vide)	0	1	$\hbar\omega$	1
1	0	10 >	1	2	2ħω	2
0	1	01 >				
2	0	20 >	2	3	3ħω	3
1	1	11 >				
0	2	02 >				
n	0	n0 >	n	n+1		$C_{n+1}^{n} = n+1$

n ₁	n ₂	vecteurs propres de N ₁ et N ₂ : $ n_1n_2 >$	$n = n_1 + n_2$	n + p/2 (p = 2)	valeurs propres de H : E _n (4.43)	dégénérescence (4.44)
n-1	1	n-1 1 >				
n-s	S	n-s s >			(n+1)ħω	
0	n	0n >				

Tableau 2 : Valeurs propres et vecteurs propres de l'oscillateur à p = 2 degrés de liberté dans un champ scalaire

5 – Lagrangien du champ et quantification (7)

5.1 – Champ classique

Degrés de liberté et moments conjugués du champ :

Un champ classique, de potentiel scalaire Φ , est un système avec une infinité de degrés de liberté. On a vu précédemment (point 2.3.4) le cas de l'oscillateur harmonique où les degrés de liberté forment un système discret, les coordonnées (ou degrés de liberté) étant repérées par des indices discrets 1, 2,...p avec $n_1+n_2+...+n_p = n$.

En revanche, si les degrés de liberté sont repérés par des indices continus, ce ne sont plus des grandeurs telles que la position ou l'impulsion, ou plus généralement le degré de liberté q et son moment conjugué p, qui sont les grandeurs dynamiques du système. Le degré de liberté est une fonction Φ de moment conjugué Π auxquels correspondent des opérateurs quantiques de champ. Cette situation est par exemple celle où l'amplitude du champ $\Phi(\mathbf{r})$ est une fonction continue de chaque point de l'espace \mathbf{r} . Dans ce cas le lagrangien L du système est une fonctionnelle de la « coordonnée » Φ et de sa dérivée temporelle $\Phi' = d\Phi/dt$:

$$L = \int \tilde{L}(\Phi, \nabla \Phi, \Phi') d^3 \mathbf{r} \quad (5.1)$$

où \tilde{L} est la densité lagrangienne. Soit S l'action du champ définie par :

$$S = \int_{t_1}^{t_2} Ldt$$

c'est une fonctionnelle de $\Phi(\mathbf{r},t)$. Le principe de moindre action : $\delta S = 0$ avec $\delta \Phi(t_1) = \delta \Phi(t_2) = 0$, conduit aux équations de Lagrange :

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \Phi'(x^q)} + \sum_{p} \frac{\partial}{\partial x^p} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \left(\frac{\partial \Phi(x^q)}{\partial x^p}\right)} = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \Phi(x^q)}$$
(5.2a)

En utilisant les coordonnées d'espace-temps $x^{\mu} = (x^0, x^1, x^2, x^3)$ avec $x^0 = ict$, (5.2a) prend la forme condensée :

$$\frac{\partial \widetilde{L}}{\partial \Phi(x^{\alpha})} = \partial_{\mu} \frac{\partial \widetilde{L}}{\partial (\partial_{\mu} \Phi(x^{\alpha}))} \quad \text{(5.2b)}$$

où $\partial_{\mu} = \partial/\partial x^{\mu}$ et la convention de sommation d'Einstein est appliquée ; comme dx⁰ = icdt on a noté :

⁷ Voir par exemple [2], [3], [4].

 $\Phi' = d \Phi/d t$ mais $\partial_0 = \partial \Phi/i c \partial t$.

 $\Phi(\mathbf{r},t)$ variant de manière continue avec les coordonnées d'espace \mathbf{r} , chaque élément infinitésimal d'espace $(\mathbf{r}, \mathbf{r}+d\mathbf{r})$ correspond à un élément de degré de liberté $\Phi(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r}$. Son moment conjugué, ou impulsion généralisée, est donné par la dérivée fonctionnelle de L par rapport à $\Phi(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r}$:

$$\Pi(\boldsymbol{r},t)d^{3}\boldsymbol{r} = \frac{\delta L}{\delta \Phi'(\boldsymbol{r},t)}$$
 (5.3)

Or la différentiation fonctionnelle du lagrangien $L(\Phi, \Phi')$ est :

$$\delta L = \int \left[\left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \Phi} - \nabla \cdot \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (\nabla \Phi)} \right) \delta \Phi + \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \Phi'} \delta \Phi' \right] d^3 \mathbf{r} = \int \left(\frac{\delta \tilde{L}}{\delta \Phi} \delta \Phi + \frac{\delta \tilde{L}}{\delta \Phi'} \delta \Phi' \right) d^3 \mathbf{r}$$

d'où les identifications :

$$\frac{\delta \tilde{L}}{\delta \Phi} = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \Phi} - \nabla \cdot \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (\nabla \Phi)} \quad (5.4a)$$
$$\frac{\delta \tilde{L}}{\delta \Phi'} = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \Phi'} \quad (5.4b)$$

Donc <u>on n'a pas</u> $\frac{\delta \tilde{L}}{\delta \Phi} = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \Phi}$!

Des équations d'Euler-Lagrange (5.2b), puisque $\nabla \cdot \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (\nabla \Phi)} = \sum_{q} \frac{\partial}{\partial x^{q}} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (\partial_{q} \Phi)}$, (5.4a) devient : $\frac{\delta \tilde{L}}{\delta \Phi} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (\partial_{t} \Phi)} + \nabla \cdot \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (\nabla \Phi)} - \nabla \cdot \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (\nabla \Phi)}$

soit :

$$\frac{\delta \tilde{L}}{\delta \Phi} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (\partial_t \Phi)} \quad (5.4c)$$

En remplaçant dans δL , qui intervient dans la définition de Π :

$$\Pi d^{3} r = \frac{\delta L}{\delta \Phi'} = \int \left(\frac{\delta \tilde{L}}{\delta \Phi} \frac{\delta \Phi}{\delta \Phi'} + \frac{\delta \tilde{L}}{\delta \Phi'} \frac{\delta \Phi'}{\delta \Phi'} \right) d^{3} r = \int \frac{\delta \tilde{L}}{\delta \Phi'} d^{3} r \quad \text{puisque} \quad \frac{\delta \Phi}{\delta \Phi'} = 0 \quad \text{. D'où, suite à (5.4b)} :$$
$$\Pi(r, t) = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \Phi'} \quad (5.5)$$

De (5.3) il suit que la dérivée temporelle de l'impulsion généralisée est :

$$\Pi'(\mathbf{r},t)d^{3}\mathbf{r} = \frac{\delta L}{\delta\Phi(\mathbf{r},t)} \quad \text{(attention:} \quad \frac{\delta L}{\delta\Phi} \neq \frac{\partial L}{\partial\Phi} \quad \text{!)}$$

En explicitant δL , de (5.4a) on a : $\Pi' = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \Phi} - \nabla \cdot \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (\nabla \Phi)}$ (puisque $\delta \Phi' / \delta \Phi = 0$).

On peut exprimer les vitesses généralisées des degrés de liberté en fonction des coordonnées généralisées (ou degrés de liberté) et des moments conjugués, en utilisant l'hamiltonien du champ construit comme la transformée de Legendre du lagrangien :

$$H(\Phi,\Pi) = \int \Pi(\mathbf{r},t) \Phi'(\mathbf{r},t) d^3 \mathbf{r} - L(\Phi,\Phi') = \int \widetilde{H}(\mathbf{r},t) d^3 \mathbf{r} \quad (5.6a)$$

où \widetilde{H} est la densité hamiltonienne :

$$\widetilde{H}(\mathbf{r},t) = \Pi(\mathbf{r},t) \Phi'(\mathbf{r},t) - \widetilde{L}(\mathbf{r},t)$$
 (5.6b)

De (5.6b): $\widetilde{L}(\Phi, \Phi') = \Pi \Phi' - \widetilde{H}(\Phi, \Pi)$ d'où: $\frac{\partial \widetilde{L}}{\partial \Phi} = -\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \Phi}$ et $\frac{\partial \widetilde{L}}{\partial (\nabla \Phi)} = -\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial (\nabla \Phi)}$ que l'on remplace dans Π' :

$$\Pi' = -\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \Phi} + \nabla \cdot \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial (\nabla \Phi)} = -\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \Phi} + \sum_{q} \frac{\partial}{\partial x^{q}} \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial (\partial_{q} \Phi)} \quad (5.7)$$

De (5.6b) on obtient aussi la dérivée temporelle du degré de liberté Φ : $\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \Pi} = 0 = \Phi' - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \Pi}$ d'où :

$$\Phi' = \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \Pi} \quad (5.8)$$

L'évolution du champ est donnée par les équations de Hamilton (5.7) et (5.8).

Comme exemple de champ classique il y a le champ scalaire libre vu plus haut, dont la densité lagrangienne est :

$$\tilde{L} = -\frac{1}{2}\partial_{\alpha}\Phi\partial^{\alpha}\Phi - \frac{1}{2}\frac{\mu^2}{c^2}\Phi^2$$

où $\mu = mc^2/\hbar$, Φ étant le potentiel d'auto-interaction d'une particule massive libre de masse m. Les coordonnées dans l'espace-temps de Minkowski étant x^a = (x⁰, x^q), q = 1,2,3 où x⁰ = ict, il vient :

$$\widetilde{L} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{i c \partial t} \frac{\partial \Phi}{i c \partial t} + \sum_{q} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x^{q}} \right)^{2} + \frac{\mu^{2}}{c^{2}} \Phi^{2} \right) \text{ soit }$$
$$\widetilde{L} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{c^{2}} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)^{2} - (\nabla \Phi)^{2} - \frac{\mu^{2}}{c^{2}} \Phi^{2} \right]$$
(5.9)

Dans les équations d'Euler-Lagrange (5.2a) l'utilisation de (5.9) donne l'équation de Klein-Gordon (4.32). Dans ce cas (5.5) devient :

$$\Pi = \frac{1}{c} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{1}{c} \Phi' \quad (5.10)$$

(Cette écriture est licite car Φ peut être exprimé en incluant la vitesse de la lumière c ainsi que \hbar , sa dimension étant à ces facteurs près ; c'est pourquoi dans les ouvrages on pose souvent c = \hbar = 1, chose que l'on ne fera pas ici).

Dans ce cas (5.6a) donne : $\widetilde{H} = \frac{1}{2} (\Pi^2 + (\nabla \Phi)^2 + \frac{\mu^2}{c^2} \Phi^2)$ soit :

$$\widetilde{H} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c^2} \Phi'^2 + (\nabla \Phi)^2 + \frac{\mu^2}{c^2} \Phi^2 \right) \quad (5.11)$$

Pour la quantification du champ libre massif, on considère la décomposition (4.33) qui, appliquée à l'équation de Klein-Gordon (4.32), donne les équations des modes de l'oscillateur harmonique (4.34). En exprimant la quantité de mouvement **p** en tant qu'opérateur $p=-i\hbar\nabla$, l'équation aux valeurs propres $-\nabla^2 f_k = w_k^2 f_k$ s'écrit : $p^2 f_k = -\hbar^2 w_k^2 f_k$ d'où : $-i\hbar\nabla f_k(r) = \hbar w_k f_k$ soit :

$$-i\hbar\nabla f_k = \hbar k f_k(\mathbf{r})$$
 (5.12)

où l'on a posé le vecteur $\mathbf{w}_k = \mathbf{k}$, avec donc $\mathbf{w}_k^2 = \mathbf{w}_k \cdot \mathbf{w}_k = \mathbf{k}^2$. Les fonctions propres de l'opérateur \mathbf{p} sont $f_k(\mathbf{r})$; leurs valeurs propres sont les vecteurs $\hbar \mathbf{k}$, de composantes $\hbar \mathbf{k}_q$, q = 1, 2, 3 telles que : $-i\partial f_k/\partial x^q = k_a f_k$. Les fonctions propres sont donc de la forme :

$$f_k(\mathbf{r}) = A_k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (5.13)$$

On calcule l'hamiltonien à partir de (5.11) et (5.13). D'après (5.5) :

$$\Pi(\mathbf{r},t)d^{3}\mathbf{r} = \frac{\delta L}{\delta \Phi'(\mathbf{r},t)} = \sum_{k} \frac{\partial L}{\partial q_{k}'} \frac{\delta q_{k}'}{\delta \Phi'(\mathbf{r},t)} \quad \text{(on a note } q_{k}' = dq_{k}/dt \text{)}$$

Or $p_k = \frac{\partial L}{\partial q_k'}$ et d'après (4.33): $q_k' = \int f_k(\mathbf{r}) \Phi'(\mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{r}$ donc $\frac{\delta q_k'}{\delta \Phi'} = f_k(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}$ d'où : $\Pi(\mathbf{r}, t) = \sum_k p_k f_k(\mathbf{r})$ (5.14a)

De (4.33) on a aussi :

$$\Phi(\boldsymbol{r},t) = \sum_{k} q_{k}(t) f_{k}(\boldsymbol{r})$$
 (5.14b)

En utilisant (5.13) et (81a,b) dans (5.11) il vient :

$$H = \int \widetilde{H} d^{3} \mathbf{r} = \int \frac{1}{2} (\Pi^{2} + (\nabla \Phi)^{2} + \frac{\mu^{2}}{c^{2}} \Phi^{2}) d^{3} \mathbf{r}$$
$$= \frac{1}{2} \sum_{k,j} \left[p_{k} p_{j} \int f_{k} f_{j} d^{3} \mathbf{r} + q_{k} q_{j} \int (\nabla f_{k} \cdot \nabla f_{j}) d^{3} \mathbf{r} + \frac{\mu^{2}}{c^{2}} q_{k} q_{j} \int f_{k} f_{j} d^{3} \mathbf{r} \right]$$

En intégrant par partie et en utilisant $-\nabla^2 f_k = k^2 f_k$ on a :

$$\int (\nabla f_k \cdot \nabla f_j) d^3 \mathbf{r} = -\int f_k \nabla^2 f_j d^3 \mathbf{r} = \mathbf{k}^2 \int f_k f_j d^3 \mathbf{r} \quad \text{d'où}:$$
$$H = \frac{1}{2} \sum_{k,j} (p_k p_j + (\mathbf{k}^2 + \frac{\mu^2}{c^2}) q_k q_j) \int f_k f_j d^3 \mathbf{r}$$

or les fonctions propres f_k sont orthogonales : $\int f_k f_j d^3 r = \delta_{ij} d^3 r$ d'où la densité hamiltonienne du champ :

$$\widetilde{H} = \frac{1}{2} \sum_{k} \left(p_k^2 + \frac{\omega_k^2}{c^2} q_k^2 \right) \quad (5.15)$$

La décomposition (5.15) traduit que l'énergie du champ est la superposition d'énergies d'oscillateurs harmoniques de fréquences données par :

$$\omega_k^2 = c^2 k^2 + \mu^2$$
 (5.15bis)

associées à chaque mode d'oscillation de vecteurs d'onde **k**. En effet, les équations de Hamilton, en cohérence avec (5.10), donnent l'équation des modes $q_k(t)$: $\frac{1}{c}q_k' = \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial p_k}$ et $p_k' = -\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial q_k}$ deviennent, compte tenu de (5.15): $\frac{1}{c}q_k' = p_k$ et $p_k' = \frac{1}{c^2}q_k'' = -\frac{\omega_k^2}{c^2}q_k$ c'est-à-dire l'équation de l'oscillateur

harmonique :

$$q_k'' + \omega_k^2 q_k = 0$$
 (5.16)

Les solutions de (5.16) sont :

$$q_k(t) = a_k \exp i \omega_k t + a_k' \exp(-i \omega_k t)$$
 (5.16bis)

Les amplitudes a_k et a_k' sont à déterminer.

En utilisant (4.36a et b), où la fréquence n'est plus constante mais diffère d'un mode à l'autre, on a :

$$b_{k}-b_{k}^{+}=2i\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega_{k}}}p_{k} \text{ et } b_{k}+b_{k}^{+}=2\sqrt{\frac{m\omega_{k}}{2\hbar}}q_{k} \text{ d'où :}$$

$$p_{k}=\frac{1}{2}i\sqrt{2\hbar m\omega_{k}}(b_{k}^{+}-b_{k}) \quad (5.17a)$$

$$q_{k}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_{k}}}(b_{k}+b_{k}^{+}) \quad (5.17b)$$

De (5.17b) et (5.14b) on a donc :

$$\Phi(\mathbf{r},t) = \sum_{k} q_{k}(t) f_{k}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{k} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_{k}}} (b_{k} + b_{k}^{+}) f_{k}(\mathbf{r})$$
(5.18a)

et de (5.13) :

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \sum_{k} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_{k}}} (b_{k} + b_{k}^{+}) A_{k} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$

En remplaçant $q_k(t)$ par (5.16bis) il vient :

$$\Phi(\mathbf{r},t) = \sum_{k} (a_{k} e^{i\omega_{k}t} + a_{k}' e^{-i\omega_{k}t}) A_{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$
(5.18b)

En comparant (5.18b) avec l'égalité précédente on a les relations entre les amplitudes des modes et les opérateurs création et annihilation des particules occupant ces modes:

$$a_{k}e^{i\omega_{k}t} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_{k}}}b_{k}$$
$$a_{k}'e^{-i\omega_{k}t} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_{k}}}b_{k}^{+}$$

et puisque $(b_k^+)^+ = b_k^-$ il vient la relation entre les amplitudes : $a_k^- a_{-k}^* = a_{-k}^-$

Pour Π , (5.14a) et (5.17a) donnent, compte tenu de (5.13) :

$$\Pi(\mathbf{r},t) = \sum_{k} p_{k} f_{k}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} i \sum_{k} \sqrt{2\hbar m \omega_{k}} (b_{k}^{+} - b_{k}) A_{k} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$
(5.18c)

D'après (5.10), en utilisant (5.18b) :

$$\Pi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{c} \Phi' = \frac{1}{c} \sum_{k} i \omega_{k} (a_{k} e^{i \omega_{k} t} - a_{k}' e^{-i \omega_{k} t}) A_{k} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$
(5.18d)

On déduit ensuite de (5.18a), (5.18c) et (4.36b) les relations de commutation :

$$\begin{split} \left[\Phi(\mathbf{r}), \Phi(\mathbf{r}') \right] &= \sum_{k} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_{k}}} (b_{k} + b_{k}^{+}) f_{k}(\mathbf{r}) \sum_{j} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_{j}}} (b_{j} + b_{k}^{+}) f_{j}(\mathbf{r}') \\ &- \sum_{j} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_{j}}} (b_{j} + b_{k}^{+}) f_{j}(\mathbf{r}') \sum_{k} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_{k}}} (b_{k} + b_{k}^{+}) f_{k}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\hbar}{2m} \sum_{k,j} \frac{f_{k} f_{j}}{\sqrt{\omega_{k} \omega_{j}}} \left(\left[b_{k}, b_{j} \right] + \left[b_{k}, b_{j}^{+} \right] - \left[b_{j}, b_{k}^{+} \right] + \left[b_{k}, b_{j} \right]^{+} \right) \end{split}$$

Comme $[b_k, b_j] = 0$ et $[b_k, b_j^+] = [b_j, b_k^+] = \delta_{kj}$ il vient :

$$[\Phi(r), \Phi(r')]=0$$
 (5.19a)

On montre de même :

$$[\Pi(r), \Pi(r')] = 0$$
 (5.19b)

Ces relations de commutation (5.19a et b) traduisent la possibilité de mesurer simultanément en deux endroits différents les mêmes grandeurs du champ. Ce n'est plus le cas lorsqu'il s'agit de la mesure des grandeurs conjuguées, en effet :

$$\begin{split} & \left[\Phi(\mathbf{r}), \Pi(\mathbf{r}')\right] = \frac{1}{2}i\hbar\sum_{k,j}\sqrt{\frac{\omega_j}{\omega_k}}f_k(\mathbf{r})f_j(\mathbf{r}')\left[(b_k + b_k^+)(b_j^+ - b_j) - (b_j^+ - b_j)(b_k + b_k^+)\right] \\ & = i\hbar\sum_{k,j}\sqrt{\frac{\omega_j}{\omega_k}}f_k(\mathbf{r})f_j(\mathbf{r}')\delta_{kj} = i\hbar\sum_k f_k(\mathbf{r})f_k(\mathbf{r}') \end{split}$$

Or on a vu que les f_k vérifient la relation de fermeture : $\sum_k f_k(\mathbf{r}) f_k(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ d'où :

$$[\Phi(r), \Pi(r')] = i\hbar \delta(r - r')$$
 (5.19c)

Généralisation aux fonctions de base complexes :

Les relations (5.18b) et (5.18d) montrent que Φ et Π s'expriment comme une combinaison d'opérateurs de création et d'annihilation par l'intermédiaire des a_k et a_k '.

On généralise cette situation à la quantification d'un champ de telle sorte qu'elle soit indépendante du choix des fonctions de base fj, lesquelles, dans leur utilisation précédente, étaient choisies avec un certain arbitraire étant donné que les valeurs propres de (- ∇^2) sont dégénérées.

Soit donc une suite orthonormale complète de fonctions de base complexes notées u_k , et $\hbar \omega_k$ l'énergie correspondante du mode indicé par k ; u_1 , u_2 ... u_k ... vérifient encore les conditions :

orthonormalité : $\int u_k^* u_j d^3 \mathbf{r} = \delta_{kj} \quad (5.20a)$ fermeture : $\sum_k u_k(\mathbf{r}) u_k^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (5.20b)$ équation aux valeurs propres du laplacien : $(\nabla^2 + \mathbf{k}^2) u_k = 0 \quad (5.20c)$ $\omega_k = \sqrt{c^2 \mathbf{k}^2 + \mu^2} \quad (5.20d)$

On associe à chaque u_k les opérateurs hermitiques conjugués d'annihilation a_k et de création a_k^* , vérifiant les relations de commutation :

$$\begin{bmatrix} a_k, a_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_k^+, a_j^+ \end{bmatrix} = 0 \quad (5.21a)$$
$$\begin{bmatrix} a_k, a_j^+ \end{bmatrix} = \delta_{kj} \quad (5.21b)$$

Comme pour (4.37), l'observable nombre de corpuscules dans l'état n°k est :

$$N_k = a_k^+ a_k$$
 (5.22)

Plus généralement tous les observables du système associé au champ s'expriment avec a_k et a_k^+ . (5.18b) et (5.18d) se généralisent en :

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{k} \sqrt{\frac{\hbar}{2 \, m \, \omega_{k}}} (a_{k} u_{k}(\mathbf{r}) + a_{k}^{+} u_{k}^{*}(\mathbf{r})) \quad (5.23a)$$

$$\Pi(\mathbf{r}) = \sum_{k} \frac{1}{2} i \sqrt{2 \, \hbar \, m \, \omega_{k}} (a_{k}^{+} u_{k}^{*}(\mathbf{r}) - a_{k} u_{k}(\mathbf{r})) \quad (5.23b)$$

L'opérateur hamiltonien est encore donné par (4.38) :

$$H = \sum_{k} H_{k} = \sum_{k} (a_{k}^{+}a_{k}^{-} + \frac{1}{2})\hbar\omega_{k} = \sum_{k} (N_{k}^{-} + \frac{1}{2})\hbar\omega_{k} \quad (5.23c)$$

Les états quantiques d'un système regroupent ceux associés à l'énergie $\hbar\omega_k$ (donc ceux repérés par l'indice k) et d'autres repérés par des indices p. Les fonctions de base s'étendent alors pour l'ensemble des états rattachés à un même état d'énergie par la transformation unitaire [T] :

$$u_{kp} = \sum_{q} T_{pq} f_{kq} \quad (5.24a)$$

et l'inverse : $f_{kq} = \sum_{p} (T^{+})_{qp} u_{kp} \quad (5.24b)$

puisque par définition : $[T]^{-1} = [T^+]$.

Cherchons les conditions pour que (5.18a) et (5.23a), exprimés avec des fonctions de bases différentes, représentent le même champ $\Phi(\mathbf{r})$, et pour que (5.18c) et (5.23b) représentent le même $\Pi(\mathbf{r})$, pour toute valeur de l'état d'énergie indicé par k ; en utilisant (5.24a et b) dans ces relations il vient :

$$\sum_{p} (a_{kp}u_{kp} + a_{kp}^{+}u_{kp}^{*}) = \sum_{q} (b_{kq} + b_{kq}^{+})f_{kq}$$

d'où la condition nécessaire et suffisante : $\sum_{p} a_{kp} u_{kp} = \sum_{q} b_{kq} f_{kq}$, et en remplaçant f_{kq} par (5.24b), les opérateurs annihilation et création sont :

$$\begin{vmatrix} a_{kp} = \sum_{q} T_{pq}^{*} b_{kq} \\ a_{kp}^{+} = \sum_{q}^{q} T_{pq} b_{kq}^{+} \end{vmatrix}$$
(5.25)

Les relations (5.25) montrent que les opérateurs création sont en correspondance linéaire identique à celle des fonctions de bases utilisées pour leur description ; il en est de même pour les opérateurs annihilation. On vérifie aisément que, quel que soit k :

$$\begin{bmatrix} a_{kp}, a_{kq}^{+} \end{bmatrix} = \delta_{pq} \quad (5.26a)$$

$$N_{k} = \sum_{p} a_{kp}^{+} a_{kp} = \sum_{q} b_{kq}^{+} b_{kq} \quad (5.26b)$$

Donc le nombre de particules dans l'état k ne dépend pas du choix des fonctions de base. Il en est de même de l'hamiltonien par la relation (5.23c).

Exemple des ondes planes :

Dans la modélisation on considère un élément d'espace assimilé à un cube élémentaire de côté L que l'on fera tendre à l'infini L $\rightarrow \infty$ pour l'espace total où évolue le champ scalaire. Les fonctions de base sont supposées périodiques aux bornes du cube :

$$u_{k}(\frac{L}{2}, y, z) = u_{k}(-\frac{L}{2}, y, z) \quad , \quad u_{k}(x, \frac{L}{2}, z) = u_{k}(x, -\frac{L}{2}, z) \quad , \quad u_{k}(x, y, \frac{L}{2}) = u_{k}(x, y, -\frac{L}{2})$$

On choisit la base : $u_k(\mathbf{r}) = C \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ où la constante C est déterminée par la condition de normali-L/2

sation (5.20a): $\int_{-L/2}^{L/2} u_k(\mathbf{r}) u_j^*(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \delta_{kj} \text{ d'où } C^2 L^3 = 1 \text{ et donc}:$

$$u_k(\mathbf{r}) = L^{-3/2} \exp(i \, \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$
 (5.27)

où $k = (k_x, k_y, k_z)$ avec $k_x = \frac{2\pi}{L}n_x$, $k_y = \frac{2\pi}{L}n_y$, $k_z = \frac{2\pi}{L}n_z$ et où les n_x, n_y, n_z sont des entiers relatifs : $n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, ...$. On remplace dans (5.23a) et (5.23b) les u_k par (5.27) : suite au caractère continu de la dépendance du champ avec l'espace, la modélisation doit faire tendre L vers l'infini, comme cela a été annoncé. Les sommations sur les indices discrets doivent alors être remplacées par des intégrations. Ce remplacement est effectué de la manière suivante :

Sur une bande infinitésimale de modes (**k**, **k** + d³**k**), puisque **k** = 2π **n**/L, il y a d³**n** = d³**k** (L/2 π)³ jeux de valeurs possibles pour les composantes **n** = (n_x, n_y, n_z). Alors chaque sommation discrète \sum_{k} doit être

remplacée par le terme d'intégration (sans dimension) : $\sum_{k} \rightarrow \int \left(\frac{L}{2\pi}\right)^{3} d^{3}k$. On effectue alors les

changements de variables : $u_k(\mathbf{r}) \rightarrow \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{3/2} u(\mathbf{k})$, $a_k(\mathbf{r}) \rightarrow \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{3/2} a(\mathbf{k})$ et les conditions (5.20) se réécrivent :

$$\int u^{*}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}) u(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{r}) d^{3} \boldsymbol{r} = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \int u(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}) u^{*}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}') d^{3} \boldsymbol{k} = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') (\nabla^{2} + \boldsymbol{k}^{2}) u(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}) = 0 \omega(\boldsymbol{k}) = \sqrt{\boldsymbol{k}^{2} c^{2} + \mu^{2}}$$
(5.28)

Les relations de commutation (5.21a et b) deviennent :

$$\begin{bmatrix} a(\mathbf{k}), a(\mathbf{k}') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^+(\mathbf{k}), a^+(\mathbf{k}') \end{bmatrix} = 0 \\ \begin{bmatrix} a(\mathbf{k}), a^+(\mathbf{k}') \end{bmatrix} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$
(5.29)

Et les relations (5.23a,b,c), compte tenu de (5.27), deviennent :

$$\Phi(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int \sqrt{\frac{\hbar}{2\,m\omega(\mathbf{k})}} d^3\mathbf{k} (a(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + a^+(\mathbf{k})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})$$
(5.30a)
$$\Pi(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{1}{2}i\sqrt{2\,\hbar\,m\omega(\mathbf{k})} d^3\mathbf{k} (a^+(\mathbf{k})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - a(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})$$
(5.30b)

L'hamiltonien (5.23c) se réécrit :

$$H = \int (a^{+}(\mathbf{k})a(\mathbf{k}) + \frac{1}{2})\hbar\omega(\mathbf{k})d^{3}\mathbf{k} = \int (N(\mathbf{k}) + \frac{1}{2})\hbar\omega(\mathbf{k})d^{3}\mathbf{k} \quad (5.30c)$$

où l'opérateur nombre d'occupations est $N(\mathbf{k}) = a^+(\mathbf{k})a(\mathbf{k})$. Pour Φ , en comparant (5.30a) avec (5.18b) ré-exprimée sous la forme intégrale selon les modalités indiquées plus haut, on déduit que l'amplitude A_k devenue $A(\mathbf{k})$ des fonctions de base est égale à :

$$A(k) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(k)}}$$
 (5.31)

Revenons à l'état du vide quantique et à la création d'un état à 1 particule par l'action de l'opérateur création :

Par définition, le vide quantique |0 > est l'état d'annihilation par les opérateurs d'annihilation (cf. (4.49)) :

$$\forall \mathbf{k} \in \mathbf{R}^3; a(\mathbf{k}) | 0 > = | 0 > (5.32)$$

avec <0|0>=1 . Un état à 1 particule est construit à partir de l'état du vide par l'action d'un opérateur création :

$$|k>=a^{+}(k)|0>$$
 (5.32bis)

et l'on a :

$$< k | k' > = < 0 | a^{++}(k) | k' > = < 0 | a(k) a^{+}(k') | 0 > = \delta(k-k')$$

On a vu que l'espace de Fock est construit sur la base des vecteurs propres $|n(\mathbf{k}) >$ de l'opérateur $N(\mathbf{k})$ (cf. (4.54)) :

$$N(\mathbf{k})|n(\mathbf{k})\rangle = a^{+}(\mathbf{k})a(\mathbf{k})|n(\mathbf{k})\rangle = n(\mathbf{k})|n(\mathbf{k})\rangle$$
 (5.33)

D'après (5.30a), le champ $\Phi(\mathbf{r},t)$ en tant qu'opérateur produit une particule en la position spatiale **r** à partir de l'état du vide |0 > :

$$\Phi(\mathbf{r},t)|0\rangle = \int A(\mathbf{k}) d^3 \mathbf{k} (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a(\mathbf{k})|0\rangle + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a^+(\mathbf{k})|0\rangle)$$

où A(k) est donnée par (5.31) ; et d'après (5.32) et (5.32bis) :

$$\Phi(\mathbf{r},t)|0\rangle = \int A(\mathbf{k}) d^3 \mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a^+(\mathbf{k})|0\rangle \text{ soit :}$$

$$|\mathbf{r},t\rangle = \Phi(\mathbf{r},t)|0\rangle = \int A(\mathbf{k})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|\mathbf{k}\rangle d^{3}\mathbf{k}$$
 (5.34)

Terminons cette présentation du cas champ classique en montrant que les corpuscules d'état $|\mathbf{k}\rangle$ contenus dans le champ scalaire $\Phi(\mathbf{r},t)$ sont des corpuscules de masse réduite μ .

Pour cela, on montre qu'à une translation infinitésimale de vecteur $\boldsymbol{\epsilon}$ correspond l'opérateur hermitique :

$$T(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} (\boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon})$$
 (5.35)

où **P** = (P_x , P_y , P_z) est l'impulsion totale des n particules du champ :

$$P_x = \sum_{p=1}^{n} p_{x,p}, P_y = \sum_{p=1}^{n} p_{y,p}, P_z = \sum_{p=1}^{n} p_{z,p}$$

où $p_{x,p}$, $p_{y,p}$, $p_{z,p}$ sont les composantes du vecteur quantité de mouvement \mathbf{p}_p de la particule n°p. Par définition, une translation de vecteur infinitésimal $\boldsymbol{\epsilon}$ transforme l'opérateur $\Phi(\mathbf{r})$ en l'opérateur $\Phi(\mathbf{r}+\boldsymbol{\epsilon})$, et l'opérateur $\Pi(\mathbf{r})$ et l'opérateur $\Pi(\mathbf{r}+\boldsymbol{\epsilon})$, c'est-à-dire le passage du point de mesure \mathbf{r} en point de mesure $(\mathbf{r}+\boldsymbol{\epsilon})$ de Φ et de Π (et non un déplacement du système). Le développement au premier ordre au voisinage de \mathbf{r} donne :

$$\Phi(\mathbf{r}+\mathbf{\varepsilon}) = \Phi(\mathbf{r}) + \mathbf{\varepsilon} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r})$$

$$\Pi(\mathbf{r}+\mathbf{\varepsilon}) = \Pi(\mathbf{r}) + \mathbf{\varepsilon} \cdot \nabla \Pi(\mathbf{r})$$

d'où les relations de commutation :

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{P}, \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix} = i\hbar\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \nabla \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r}) \\ \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{P}, \boldsymbol{\Pi}(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix} = i\hbar\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \nabla \boldsymbol{\Pi}(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix}$$
(5.36)

Les relations (5.36) doivent être satisfaites quelle que soit **r**, ce qui implique que chaque terme de leur décomposition sur les axes x, y, z soit nul :

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{P}, \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix} - i\hbar\boldsymbol{\epsilon} \cdot \nabla \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r}) = (\varepsilon_x \begin{bmatrix} P_x, \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix} - i\hbar\varepsilon_x \frac{\partial}{\partial x} \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r})) \\ + (\varepsilon_y \begin{bmatrix} P_y, \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix} - i\hbar\varepsilon_y \frac{\partial}{\partial y} \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r})) + (\varepsilon_z \begin{bmatrix} P_z, \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix} - i\hbar\varepsilon_z \frac{\partial}{\partial z} \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r})) = 0$$

donc :

$$\begin{split} & \varepsilon_{x} \Big[P_{x}, \Phi(\boldsymbol{r}) \Big] = i \hbar \varepsilon_{x} \frac{\partial}{\partial x} \Phi(\boldsymbol{r}) \\ & \varepsilon_{y} \Big[P_{y}, \Phi(\boldsymbol{r}) \Big] = i \hbar \varepsilon_{y} \frac{\partial}{\partial y} \Phi(\boldsymbol{r}) \\ & \varepsilon_{z} \Big[P_{z}, \Phi(\boldsymbol{r}) \Big] = i \hbar \varepsilon_{z} \frac{\partial}{\partial z} \Phi(\boldsymbol{r}) \end{split}$$
 (5.37)

De même pour Π :

$$\begin{split} & \varepsilon_{x} \Big[P_{x}, \Pi(\mathbf{r}) \Big] = i \, \hbar \varepsilon_{x} \frac{\partial}{\partial x} \Pi(\mathbf{r}) \\ & \varepsilon_{y} \Big[P_{y}, \Pi(\mathbf{r}) \Big] = i \, \hbar \varepsilon_{y} \frac{\partial}{\partial y} \Pi(\mathbf{r}) \\ & \varepsilon_{z} \Big[P_{z}, \Pi(\mathbf{r}) \Big] = i \, \hbar \varepsilon_{z} \frac{\partial}{\partial z} \Pi(\mathbf{r}) \end{split}$$
(5.37bis)

À partir de (5.37) ou (5.37bis) on peut déterminer l'opérateur vectoriel **P**. En effet, pour la composante suivant x, en remarquant que $i\hbar\partial \Phi(\mathbf{r})/\partial x$ s'écrit aussi :

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial x}(\mathbf{r}) = i\hbar \int \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \frac{\partial \Phi}{\partial x}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'$$

et en utilisant la relation de commutation (5.19c): $[\Phi(\mathbf{r}'), \Pi(\mathbf{r})] = i\hbar \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = -[\Pi(\mathbf{r}'), \Phi(\mathbf{r})]$ il

vient :

$$i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial x}(\mathbf{r}) = -\int [\Pi(\mathbf{r}'), \Phi(\mathbf{r})]\frac{\partial\Phi}{\partial x}(\mathbf{r}')d^{3}\mathbf{r}' = \left[-\int\Pi(\mathbf{r}')\frac{\partial\Phi}{\partial x}(\mathbf{r}')d^{3}\mathbf{r}', \Phi(\mathbf{r})\right]$$

et en utilisant l'égalité $i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial x}(\mathbf{r}) = \left[P_{x}, \Phi(\mathbf{r})\right]$ il vient :
$$\left[P_{x}, \Phi(\mathbf{r})\right] = \left[-\int\Pi(\mathbf{r}')\frac{\partial\Phi}{\partial x}(\mathbf{r}')d^{3}\mathbf{r}', \Phi(\mathbf{r})\right]$$

qui doit être vérifiée quel que soit $\Phi(\mathbf{r})$, d'où l'identité :

$$P_{x} = -\int \Pi \frac{\partial \Phi}{\partial x} d^{3} r + \text{constante} \quad (5.38)$$

Comme $\Pi \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} (\Pi \Phi) - \frac{\partial \Pi}{\partial x} \Phi$ et que de (5.19c) on a : $\Pi(\mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}') = \Phi(\mathbf{r}') \Pi(\mathbf{r}') - i\hbar$ $\frac{\partial}{\partial x} (\Pi \Phi(\mathbf{r}')) = \frac{\partial}{\partial x} (\Phi \Pi(\mathbf{r}'))$

alors (5.38) est aussi égale à :

$$P_{x} = \int \frac{\partial \Pi}{\partial x} \Phi d^{3} \mathbf{r} + \text{constante} \quad (5.38 \text{bis})$$

P est un opérateur vectoriel, les constantes qui interviennent dans les relations (5.38) et (5.38bis) peuvent donc être égales à 0. Finalement l'opérateur vectoriel impulsion totale du champ est défini par :

$$P = -\int \Pi (\nabla \Phi) d^3 r \quad (5.39a)$$
$$P = \int (\nabla \Pi) \Phi d^3 r \quad (5.39b)$$

À partir de (5.39a et b) on peut alors exprimer **P** en fonction des opérateurs création et annihilation. D'après (5.30a) et (5.30b) :

$$\Phi(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(\mathbf{k})}} d^3 \mathbf{k} (a(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + a^+(\mathbf{k})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})$$

d'où :

$$\nabla \Phi(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(\mathbf{k})}} i \, \mathbf{k} (a(\mathbf{k}) e^{i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - a^+(\mathbf{k}) e^{-i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) d^3\mathbf{k}$$

et :

$$\Pi(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{1}{2} i \sqrt{2\hbar m \omega(\mathbf{k}')} d^3 \mathbf{k}' (a^+(\mathbf{k}')e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} - a(\mathbf{k}')e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}})$$

Alors (5.39a) est :

$$P = -\int \Pi(\nabla \Phi) d^{3}r$$

$$= \frac{\hbar}{(2\pi)^{3}} \frac{1}{2} \int d^{3}k' \int k d^{3}k \sqrt{\frac{\omega(k')}{\omega(k)}} \int d^{3}r (a^{+}(k')e^{-ik'\cdot r} - a(k')e^{ik'\cdot r})(a(k)e^{ik\cdot r} - a^{+}(k)e^{-ik\cdot r})$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\hbar}{(2\pi)^{3}} \int d^{3}k' \int k \sqrt{\frac{\omega(k')}{\omega(k)}} F(k', k) d^{3}k$$
:
$$= \frac{1}{2} \frac{(k' + k)}{(2\pi)^{3}} \int d^{3}k' \int k \sqrt{\frac{\omega(k')}{\omega(k)}} F(k', k) d^{3}k$$

0ù :

$$F(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = a^{+}(\mathbf{k}')a(\mathbf{k})\int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}d^{3}\mathbf{r} - a^{+}(\mathbf{k}')a^{+}(\mathbf{k})\int e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}d^{3}\mathbf{r} -a(\mathbf{k}')a(\mathbf{k})\int e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}d^{3}\mathbf{r} + a(\mathbf{k}')a^{+}(\mathbf{k})\int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}d^{3}\mathbf{r} =a^{+}(\mathbf{k}')a(\mathbf{k})\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') - a^{+}(\mathbf{k}')a^{+}(\mathbf{k})\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}') - a(\mathbf{k}')a(\mathbf{k})\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}') + a(\mathbf{k}')a^{+}(\mathbf{k})\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$$

donc :

$$P = \frac{1}{2}\hbar \int k(a^{+}(k)a(k) - a^{+}(-k)a^{+}(k) - a(-k)a(k) + a(k)a^{+}(k))d^{3}k$$

Or de la relation de commutation $[a(\mathbf{k}), a^+(\mathbf{k})] = 1$ on a : $a(\mathbf{k})a^+(\mathbf{k}) = 1 + a^+(\mathbf{k})a(\mathbf{k})$ que l'on remplace dans l'expression de **P** ci-dessus :

$$P = \hbar \int k a^{+}(k) a(k) d^{3}k + \frac{\hbar}{2} \int k (1 - a^{+}(-k)a^{+}(k) - a(-k)a(k)) d^{3}k$$

Puisque l'on a les commutations : $[a^+(-k), a^+(k)] = [a(-k), a(k)] = 0$

d'où $a^+(-k)a^+(k)=a^+(k)a^+(-k)$ et a(-k)a(k)=a(k)a(-k), dans la seconde intégrale les termes qui contiennent des valeurs opposées de k sont opposés ; donc la seconde intégrale est nulle, et il reste :

$$\boldsymbol{P} = \int N(\boldsymbol{k}) \, \boldsymbol{\hbar} \, \boldsymbol{k} \, d^3 \, \boldsymbol{k} \quad (5.40)$$

avec $N(\mathbf{k}) = a^+(\mathbf{k})a(\mathbf{k})$ comme on l'a vu. (5.40) montre que l'impulsion totale **P** du champ est la somme des impulsions de chaque particule du champ. En fait, l'analyse dimensionnelle de (5.40) implique qu'il s'agit d'une densité d'impulsion.

À partir de (5.40) on établit les relations de commutation de **P** avec $a(\mathbf{k})$ et $a^{+}(\mathbf{k})$:

$$[\mathbf{P}, a(\mathbf{k})] = \mathbf{P}a(\mathbf{k}) - a(\mathbf{k})\mathbf{P} = \hbar \int \mathbf{k}' (a^{+}(\mathbf{k}')a(\mathbf{k}')a(\mathbf{k}) - a(\mathbf{k})a^{+}(\mathbf{k}')a(\mathbf{k}'))d^{3}\mathbf{k}'$$

Comme a(k) et a(k') commutent on a :

$$[\mathbf{P}, a(\mathbf{k})] = \hbar \int \mathbf{k}' (a^+(\mathbf{k}')a(\mathbf{k})a(\mathbf{k}') - a(\mathbf{k})a^+(\mathbf{k}')a(\mathbf{k}'))d^3\mathbf{k}'$$

De la relation de commutation $[a^+(\mathbf{k}'), a(\mathbf{k})] = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ on a :

 $a^{+}(\mathbf{k}')a(\mathbf{k}) = a(\mathbf{k})a^{+}(\mathbf{k}') - \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ que l'on remplace dans l'expression ci-dessus :

$$[\mathbf{P}, a(\mathbf{k})] = \hbar \int \mathbf{k}' (a(\mathbf{k})a^{+}(\mathbf{k}')a(\mathbf{k}') - \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')a(\mathbf{k}') - a(\mathbf{k})a^{+}(\mathbf{k}')a(\mathbf{k}'))d^{3}\mathbf{k}$$

= $-\hbar \int \mathbf{k}' \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')a(\mathbf{k}')d^{3}\mathbf{k}'$

soit :

$$[\mathbf{P}, a(\mathbf{k})] = -\int \hbar \mathbf{k} a(\mathbf{k}) d^3 \mathbf{k} \quad (5.41a)$$
$$[\mathbf{P}, a^+(\mathbf{k})] = \int \hbar \mathbf{k} a^+(\mathbf{k}) d^3 \mathbf{k} \quad (5.41b)$$

De même :

Si l'on emploie les indices discrets k, on montre (exercice), à partir de (5.39a et b), (5.23a,b,c), (5.27), (5.28) et (5.21a et b), avec le même raisonnement que pour (5.40) et (108a,b), que l'impulsion **P** et ses relations de commutation avec les opérateurs annihilation et création sont :

$$\boldsymbol{P} = \hbar \sum_{k} \boldsymbol{k} (a_{k}^{+} a_{k}) = \sum_{k} N_{k} \hbar \boldsymbol{k} \quad (5.40 \text{bis})$$
$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{P}, a_{k} \end{bmatrix} = -\hbar \boldsymbol{k} a_{k} \quad (5.41 \text{a bis})$$
$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{P}, a_{k}^{+} \end{bmatrix} = \hbar \boldsymbol{k} a_{k}^{+} \quad (5.41 \text{b bis})$$

sommaire - page 51/75

et (5.40bis) montre également que l'impulsion totale P du champ est la somme des impulsions de chaque particule, en notant cette fois qu'il ne s'agit pas d'une densité. La réponse à cet exercice est donnée en Annexe A1.

La commutation (5.41a bis) se réécrit comme une équation aux valeurs propres :

$$Pa_k|w \ge a_k(P - \hbar k)|w \ge$$

où |w > est la fonction propre de P, de valeur propre (vectorielle) w, soit :

$$Pa_{k}|w \ge (w - \hbar k)a_{k}|w > (5.42a)$$

(5.41b bis) se réécrit de même :

$$Pa_{k}^{+}|w>=(w+\hbar k)a_{k}^{+}|w>$$
 (5.42b)

Ainsi les équations (5.42a et b) expriment que a_k et a_k^+ sont les opérateurs annihilation et création d'une particule d'impulsion $\hbar k$. Les particules d'impulsion $\hbar k$ dans le champ ont une énergie égale à

$$E_k = \hbar \omega_k = \hbar \sqrt{k^2 c^2 + \mu^2}$$

elles ont donc une masse égale à $m = \mu \hbar/c^2$.

Remarque importante :

La relation (5.30c) exprime l'hamiltonien :

$$H(t) = \int \hbar \omega(\mathbf{k}) (N(\mathbf{k}) + \frac{1}{2}) d^3 \mathbf{k} \quad (5.43)$$

Cette relation n'a de sens que si l'énergie totale est la somme des énergies des particules, pour un état

dynamique donné. Il suffit de soustraire à chaque composante d'énergie le terme $\frac{1}{2}\hbar\omega(\mathbf{k})$ qui cor-

respond à l'énergie du vide lorsque n(**k**) = 0. Ce procédé ne modifie pas les équations du mouvement puisque ce sont les différences d'énergie qui sont mesurables. On obtiendrait alors comme nouvel hamiltonien :

$$H(t) = \int \hbar \omega(\mathbf{k}) N(\mathbf{k}) d^3 \mathbf{k}$$

au lieu de (5.43). En théorie du champ classique cela est possible.

En revanche, lorsque le champ est couplé à la gravitation, ce procédé n'est plus autorisé puisque la gravitation affecte aussi le vide et contribue donc à son énergie. Dans ce cas l'énergie du vide est représentée par, ou est contenue dans la constante cosmologique.

Comme dit dans [4] : « C'est dans l'état actuel des connaissances, le plus grave problème qu'ait à affronter la cosmologie théorique, et il provient de la physique des particules ».

5.2 – Couplage d'un champ classique avec un système de particules

Soit un champ scalaire classique en interaction avec une particule différente et externe à celles constitutives de ses états repérés par **k**. L'interaction a pour hamiltonien H_t égal à la somme de l'hamiltonien du champ libre H, étudié précédemment, de l'hamiltonien de la particule H_p, et de l'hamiltonien H' du champ perturbé par l'interaction :

$$H_t = H + H_p + H'$$
 (5.44)

Soit \mathbf{P}_p l'impulsion de la particule, \mathbf{r}_p sa position, et m_p sa masse. Dans l'approximation non relativiste son hamiltonien est :

$$H_{p} = \frac{\boldsymbol{P_{p}}^{2}}{2m_{p}} + V(\boldsymbol{r_{p}}) \quad (5.45)$$

En supposant que $m_p > m = \mu \hbar/c^2$ l'hamiltonien perturbé de l'interaction est :

$$H' = g \Phi(r_p)$$

où g est la constante de couplage. D'après (5.30a) :

$$H' = g(2\pi)^{-3/2} \int \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(\mathbf{k})}} (a(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{p}} + a^{+}(\mathbf{k})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{p}})d^{3}\mathbf{k}$$

Mais l'approximation non relativiste implique de couper la contribution à l'interaction les termes de hautes fréquences (k élevé) :

$$k = \|\boldsymbol{k}\| \gg k_{max} = \frac{m_p c}{\hbar} \quad (5.46)$$

Cette coupure aux hautes fréquences se traduit par un terme C(k) introduit dans les intégrandes de H' :

$$H' = g(2\pi)^{-3/2} \int \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(k)}} C(k) (a(k)e^{ik\cdot r_p} + a^+(k)e^{-ik\cdot r_p}) d^3k \quad (5.47a)$$

$$C(k) = 1 \text{ pour } k \le k \max_{max} \left| (5.47b) \right| \quad (5.47b)$$

 $C(\mathbf{k})=0$ pour $\kappa > \kappa_{max}$ H' commute avec ($\mathbf{P}_p + \mathbf{P}$). H_t est invariant par rotation et réflexion ($\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$) mais ne l'est pas par translation à cause de l'interaction. Cette théorie d'interaction d'une particule avec un champ s'applique à l'inter-

tion à cause de l'interaction. Cette théorie d'interaction d'une particule avec un champ s'applique à l'interaction d'un atome avec un champ électromagnétique.

Soit l'hamiltonien sans interaction :

où :

$$H_0 = H + H_p$$

Soit la suite orthonormale complète des vecteurs propres de H_p : $|\alpha_1 \rangle$, ..., $|\alpha_m \rangle$, ..., et les énergies propres correspondantes : E_{p1} , ..., E_{pm} , ... Multipliant $|\alpha_m \rangle$ par l'état du vide $|0 \rangle$ de l'espace du champ libre (H) on obtient un vecteur $|\alpha_m \rangle$ tel que :

$$H_0 |\alpha_m 0 \ge E_m |\alpha_m 0 \ge$$

qui fournit une suite orthonormale complète de vecteurs propres de H par actions successives des opérateurs de création $\alpha^{*}(\mathbf{k})$ sur |0 >. On obtient aussi une suite orthonormale complète de vecteurs propres de H₀ par actions successives de $\alpha^{*}(\mathbf{k})$ sur les $|\alpha_{m} >$. Ces actions de $\alpha^{*}(\mathbf{k})$ sur |0 > et sur $|\alpha_{m} >$ créent une base formée de vecteurs propres de H₀, notée |n >:

$$H_0|n \ge E_n|n \ge$$

Il s'ensuit que dans l'état $|n \rangle$ la particule est dans un état propre $|\alpha_m \rangle$ de H_p tandis que le champ contient alors un nombre ξ de particules d'impulsions $\hbar k_1$, $\hbar k_2$, ..., $\hbar k_{\xi}$. On a donc $|n \rangle$ de la forme :

 $|n\rangle = |\alpha_m k_1 k_2 \dots k_{\xi}\rangle$. Dans le cas d'une seule particule dans l'état $|\mathbf{k}_1\rangle$ associé à l'impulsion $\hbar \mathbf{k}_{1,n}$ on a $|n\rangle = |\alpha_m \mathbf{k}_1\rangle$, c'est le niveau à $\xi = 1$ particule :

$$H_0|\alpha_m k_1 > = (E_{k_1} + \hbar \omega(k_1))|\alpha_m k_1 >$$
 (5.48a)

Pour le niveau à ξ =2 particules dans l'état d'impulsions $\hbar \mathbf{k}_1$, $\hbar \mathbf{k}_2$, on a :

$$H_{0}|\alpha_{m}k_{1}k_{2}\rangle = (E_{k_{1}} + \hbar\omega(k_{1}) + \hbar\omega(k_{2}))|\alpha_{m}k_{1}k_{2}\rangle$$
(5.48b)

Le niveau à 1 particule s'obtient par l'action de l'opérateur création sur le niveau à 0 particule :

$$|\alpha_m k_1^{} > = a^+(k_1)|\alpha_m^{} 0 >$$
 (5.49a)

Le niveau à 2 particules s'obtient de même par l'action de l'opérateur création sur le niveau à 1 particule :

$$|\alpha_m k_1 k_2 > = a^+(k_2)a^+(k_1)|\alpha_m k_1 >$$
 (5.49b)

et ainsi de suite. Ces relations sont représentées par la figure 4 : les niveaux sont distribués en colonnes associées au nombre ξ de particules par états. Pour une colonne donnée, c'est-à-dire pour un nombre de particules fixé, on représente les différents états associés aux impulsions $\hbar \mathbf{k}_1$, $\hbar \mathbf{k}_2$, ..., $\hbar \mathbf{k}_{\xi}$.

Par exemple les niveaux à 1 particule forment la suite $|\alpha_1 \mathbf{k}_1 \rangle$, $|\alpha_2 \mathbf{k}_1 \rangle$, ..., $|\alpha_m \mathbf{k}_1 \rangle$. Les niveaux à 2 particules forment la suite $|\alpha_1 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle$, $|\alpha_2 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle$, ..., $|\alpha_m \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle$, etc.

Le couplage H', en première approximation, a pour effet de faire interagir les niveaux entre eux. L'opérateur H' est alors déterminé par les éléments de matrice du type :

$$< \alpha_p \mathbf{k_1} \dots |H'| \alpha_q \mathbf{k_1} \mathbf{k_2} \dots >$$

Par exemple, le couplage entre le niveau à 0 particule et le niveau à 1 particule s'écrit, d'après (5.47a et b) :

$$< \alpha_1 0 |H'| \alpha_m \boldsymbol{k_1} > = < \alpha_m \boldsymbol{k_1} |H'| \alpha_1 0 >^*$$

$$= g(2\pi)^{-3/2} \int \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(\boldsymbol{k_1})}} C(\boldsymbol{k_1}) < \alpha_1 |e^{i\boldsymbol{k_1}\cdot\boldsymbol{r_p}}| \alpha_m > d^3\boldsymbol{k_1}$$
(5.50a)

Le couplage entre le niveau à 2 particules et le niveau à 1 particule s'écrit :

$$< \alpha_{1} \mathbf{k_{1} k_{2}} |H'| \alpha_{m} \mathbf{k_{1}} > = < \alpha_{m} \mathbf{k_{1}} |H'| \alpha_{1} \mathbf{k_{1} k_{2}} >^{*}$$

= $g(2\pi)^{-3/2} \int \frac{\hbar}{2m\omega(\mathbf{k_{1}})} C(\mathbf{k_{1}}) < \alpha_{1} |e^{-i\mathbf{k_{2}} \cdot \mathbf{r_{p}}}| \alpha_{m} > d^{3} \mathbf{k_{2}}$ (5.50b)

1

Le couplage, tel que formalisé en (5.50a et b) par exemple, rend les états instables de par leurs interactions, et donc affectés par des transitions radiatives vers des niveaux d'énergie plus faible, accompagnées par l'émission de particules du champ. Ces transitions sont possibles si l'énergie du niveau situé juste au-dessus du fondamental est suffisante pour que soit émise une particule de masse $m = \mu \hbar/c^2$ ce qui donne comme condition d'instabilité, par exemple pour le niveau $|\alpha_p \mathbf{k}_1 > de l'état à 1 particule de$ $fondamental <math>|\alpha_1 \mathbf{k}_1 > :$

$$E_p > E_{\alpha_1} + mc^2$$



figure 4 : premiers niveaux de H₀

5.3 – Champs spinoriels de Dirac

Comme signalé, par exemple dans [4], le lagrangien (5.9), et donc l'équation d'onde de Klein-Gordon (4.32), fait apparaître le problème des énergies négatives. (4.32) est l'équivalent sous forme d'opérateurs quantiques de la relation d'Einstein de l'énergie :

$$E^2 = \boldsymbol{p^2} c^2 + m^2 c^4$$

qui est établie pour E > 0. Pourtant cette équation, sous sa forme d'opérateurs, admet deux signes : positif et négatif. Les solutions de l'énergie peuvent être :

$$E = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

Si la fonction d'onde du champ Φ est l'un de ces états d'énergie, positive ou bien négative, alors elle décrit une configuration dont l'énergie est plus petite que celle du vide quantique. Pour résoudre cette difficulté, il faut alors remplacer l'équation d'onde (4.32) par une équation dont la solution est un opérateur de champ Ψ et non plus une simple fonction d'onde de même forme que l'expression (5.34). Les états à 1 particule d'impulsion $p=\hbar k$ résultent de l'action de l'opérateur de création a⁺(**p**) sur le vide. Puisque $|\mathbf{p}>=a^+(\mathbf{p})|_0>$ donne $<\mathbf{p}|_{\Psi}>=<0|_a(\mathbf{p})|_{\Psi}>$ on a :

$$\psi(\mathbf{r},t) = \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\hbar} \int A(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle d^3\mathbf{p} = \frac{1}{\hbar} \int A(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \langle 0 | a(\mathbf{p}) | \psi(t) \rangle d^3\mathbf{p}$$

d'où l'opérateur de champ :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\hbar} \int A(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} a(\mathbf{p}) d^3 \mathbf{p} \quad (5.51)$$

qui produit une particule en **r** à partir du vide. Inversement, son conjugué Ψ^+ annihile la particule :

$$\Psi^{+}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\hbar} \int A(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} a^{+}(\mathbf{p}) d^{3}\mathbf{p} \quad (5.51 \text{bis})$$

Il s'ensuit de (5.51) les relations de commutation :

$$\begin{bmatrix} \Psi(\boldsymbol{r}), \Psi(\boldsymbol{r}') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Psi^{+}(\boldsymbol{r}), \Psi^{+}(\boldsymbol{r}') \end{bmatrix} = 0 \quad (5.52)$$
$$\begin{bmatrix} \Psi(\boldsymbol{r}), \Psi^{+}(\boldsymbol{r}') \end{bmatrix} = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$$

Les relations (5.51) définissent un opérateur à spin non nul, tandis que le champ scalaire est de spin 0.

Le champ spinoriel correspond à un spin 1/2 (en unités \hbar) (voir [5], [6]) et est solution de l'équation de Dirac. L'équation de Klein-Gordon (4.32) respecte la covariance relativiste parce que tous ses termes sont d'ordre 2. Mais pour résoudre le problème du signe de l'énergie, et donc prédire des états d'énergie totale négative, il faut trouver une équation du premier ordre, autrement dit il faut une équation de la forme pour les champs spinoriels (équation de Dirac):

$$\left(i\gamma_{\mu}\partial^{\mu} + \frac{mc}{\hbar}\right)\Psi = 0 \quad (5.53)$$

On montre que dans (5.53) Ψ est un opérateur vectoriel à 4 composantes et que les γ_{μ} sont des matrices 4x4 vérifiant la relation d'anti-commutation :

$$[\gamma^{\mu},\gamma^{\nu}]=\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}+\gamma^{\nu}\gamma^{\mu}=-2g^{\mu\nu} \quad (5.54)$$

où g^{$\mu\nu$} sont les composantes du tenseur métrique de l'espace-temps de Minkowski (appliquée à la relativité restreinte) et où :

$$\gamma^{0} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} , \quad \gamma^{1} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}^{1} \\ -\boldsymbol{\sigma}^{1} & 0 \end{pmatrix} , \quad \gamma^{2} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}^{2} \\ -\boldsymbol{\sigma}^{1} & 0 \end{pmatrix} , \quad \gamma^{3} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}^{3} \\ -\boldsymbol{\sigma}^{3} & 0 \end{pmatrix}$$

avec les matrices de Pauli : $\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

On montre que l'équation de Dirac (5.53) correspond au lagrangien de Dirac :

$$\tilde{L}_{D} = -\overline{\Psi} (i \gamma^{\mu} \partial_{\mu} + \frac{mc}{\hbar}) \Psi$$
où: $\overline{\Psi} = \Psi^{+} \gamma^{0}$
(5.55)

et que sous la condition (5.54), (5.53) permet de retrouver l'équation de Klein-Gordon (4.32) par son module :

$$(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - \frac{mc}{\hbar})(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} + \frac{mc}{\hbar})\Psi = -(\gamma_{\mu}\gamma_{\lambda}\partial^{\mu}\partial^{\lambda} + \frac{m^{2}c^{2}}{\hbar^{2}})\Psi = 0$$

Annexe 1 : Démonstration de (5.40 bis) et (5.41 a,b bis)

À partir de (5.39a et b) on exprime **P** en fonction des opérateurs création et annihilation, dans le cas où les états correspondants aux degrés de libertés sont repérés par des indices discrets. On utilise alors (5.23a,b,c) où u_k sont données par (5.27) vérifiant (5.28), et compte tenu des relations de commutation (5.21a et b) :

$$\nabla \Phi(\mathbf{r}) = \sum_{k} i \mathbf{k} \sqrt{\frac{\hbar}{2 m \omega_{k}}} (a_{k} u_{k}(\mathbf{r}) - a_{k}^{+} u_{k}^{*}(\mathbf{r}))$$

$$\mathbf{P} = -\int \Pi (\nabla \Phi) d^{3} \mathbf{r}$$

$$= \frac{1}{2} \hbar \sum_{k'} \sum_{k} \sqrt{\frac{\omega_{k'}}{\omega_{k}}} \mathbf{k} (a_{k}^{+}, a_{k} \int u_{k}^{*}, u_{k} d^{3} \mathbf{r} - a_{k}^{+}, a_{k}^{+} \int u_{k}^{*}, u_{k}^{*} d^{3} \mathbf{r} - a_{k}^{-}, a_{k} \int u_{k}, u_{k} d^{3} \mathbf{r} + a_{k}, a_{k}^{+} \int u_{k}, u_{k}^{*} d^{3} \mathbf{r})$$

où l'on a posé $u_k^* = u_k$ d'après (5.27), et en appliquant les relations d'orthogonalité (5.28) :

$$\begin{split} P &= \frac{1}{2} \hbar \sum_{k'} \sum_{k} \sqrt{\frac{\omega_{k'}}{\omega_{k}}} \mathbf{k} (a_{k}^{+}, a_{k} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k'}) + a_{k'} a_{k}^{+} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k'}) - a_{k'}^{+}, a_{k}^{+} \delta(\mathbf{k'} + \mathbf{k}) - a_{k'} a_{k} \delta(\mathbf{k'} + \mathbf{k})) \\ &= \frac{1}{2} \hbar \sum_{k} \mathbf{k} (a_{k}^{+} a_{k} + a_{k} a_{k}^{+} - a_{-k}^{+} a_{k}^{+} - a_{-k} a_{k}) \end{split}$$

De (5.29) on a : $a_k a_k^+ = 1 + a_k^+ a_k$ d'où :

$$P = \hbar \sum_{k} k a_{k}^{+} a_{k}^{+} + \frac{1}{\hbar} \sum_{k} k (1 - a_{-k}^{+} a_{k}^{+} - a_{-k}^{-} a_{k})$$

Or: $[a_{-k}^+, a_k^+] = 0$ donc: $a_{-k}^+ a_k^+ = a_k^+ a_{-k}^+$ et $[a_{-k}, a_k] = 0$ donc: $a_{-k} a_k = a_k a_{-k}$. Donc dans la deuxième somme les termes contenant des valeurs opposées de k sont opposés, il s'ensuit que la deuxième somme est nulle, il reste :

$$\boldsymbol{P} = \hbar \sum_{k} \boldsymbol{k} (a_{k}^{\dagger} a_{k}) = \hbar \sum_{k} \boldsymbol{k} N_{k} \quad (5.40)$$

De (5.40) on déduit les relations de commutation de P avec a_k et a_k^+ :

$$[\mathbf{P}, a_k] = \mathbf{P} a_k - a_k \mathbf{P} = \hbar \sum_{k'} \mathbf{k}' (a_k^+, a_k, a_k^- - a_k^- a_k^+, a_k^-)$$

Comme a_k et $a_{k'}$ commutent, il vient :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{P}, a_k \end{bmatrix} = \hbar \sum_{k'} \mathbf{k}' (a_k^+, a_k^-, a_k^+, a_{k'}, a_{k'})$$

= $\hbar \sum_{k'} \mathbf{k}' ((a_k^-, a_{k'}^+, -\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k'}))a_{k'}, -a_k^-, a_{k'}^+, a_{k'})$
= $\hbar \sum_{k'} \mathbf{k}' (a_k^-, a_{k'}^+, a_{k'}, -\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k'})a_{k'}, -a_k^-, a_{k'}^+, a_{k'})$
= $-\hbar \sum_{k'} \mathbf{k}' \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k'})a_{k'} = -\hbar \mathbf{k} a_k$

soit :

 $\begin{bmatrix} \boldsymbol{P}, \boldsymbol{a}_k \end{bmatrix} = -\hbar \boldsymbol{k} \boldsymbol{a}_k \quad (5.41a)$

De même :

$$\left[\boldsymbol{P}, \boldsymbol{a}_{k}^{+} \right] = \hbar \boldsymbol{k} \boldsymbol{a}_{k}^{+}$$
 (5.41b)

On a désigné par $\hbar k$ l'impulsion d'une particule dans l'état $u_k(\mathbf{r})$. Alors (5.40) indique que l'impulsion totale **P** du champ est la somme des impulsions de chaque particule du champ.

* *

Annexe 2 : Inégalités, ou relations d'incertitude, de Heisenberg

A2.1 – Relations d'incertitude pour l'oscillateur harmonique

Commençons par établir ces relations pour l'oscillateur harmonique dont on a vu l'importance au <u>cha-</u> <u>pitre 2</u> dans les oscillations quantiques, les couplages entre champ et particules, la création et l'annihilation de particules, les transitions d'états qui font intervenir les particules virtuelles, etc.

Avec un potentiel d'oscillateur harmonique
$$V(q) = \frac{1}{2}Kq^2$$
 l'équation de Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]\Psi(q,t) = 0$$

devient, pour les solutions stationnaires $\psi(q)$ telles que $\Psi(q,t) = \psi(q) \exp(i\frac{E}{\hbar}t)$ où $\omega = \frac{E}{\hbar}$:

$$\left[\frac{d^2}{dq^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - \frac{1}{2}Kq^2)\right] \psi(q) = 0$$

On pose $\alpha = \frac{m\omega_0}{\hbar}$ avec $\omega_0 = \sqrt{\frac{K}{m}}$, et $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$ d'où : $-\left(\frac{d^2}{dq^2} - \alpha^2 q^2\right)\psi(q) = \beta\psi(q)$ (A2.1)

C'est une équation aux valeurs propres de l'opérateur $-\left(\frac{d^2}{dq^2} - \alpha^2 q^2\right)$ où β sont les valeurs propres

à déterminer. Les solutions $\psi(q)$ recherchées doivent être uniformes et finies dans tout l'espace. Une solution particulière de (A2.1) est la fonction de Gauss :

$$\psi'(q) = \psi_0 e^{-\frac{1}{2}\alpha q^2}$$

c'est une fonction propre dont la valeur propre est : $\beta' = \alpha$

l'énergie correspondante est : $E' = \frac{\hbar^2}{2m}\beta' = \frac{\hbar^2\alpha}{2m}$.

Nous verrons que E' est l'énergie minimale de l'état fondamental : elle n'est pas nulle, contrairement à la mécanique classique où \hbar est assimilé à 0. Cette situation est rencontrée au <u>chapitre 2</u> pour l'état zéro ou vide quantique.

Les solutions générales de (A2.1) peuvent être choisies de la forme :

$$\psi(q) = \psi'(q)\varphi(q) = e^{-\frac{1}{2}\alpha q^2}\varphi(q)$$

En remplaçant dans (A2.1) on obtient l'équation différentielle en ϕ :

$$\frac{d^2 \varphi}{d q^2} - 2 \alpha q \frac{d \varphi}{d q} + (\beta - \alpha) \varphi = 0 \quad (A2.2)$$

On cherche les solutions sous forme de série : $\varphi(q) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n q^n$; (A2.2) donne alors la relation de ré-

currence :

$$(n+2)(n+1)a_{n+2}+[\beta-\alpha(2n+1)]a_n=0$$
 (A2.3)

On montre alors que, avec (A2.3), la série qui donne φ diverge plus rapidement que $\exp(-\frac{1}{2}\alpha q^2)$ quand $q \rightarrow \infty$, sauf si la série contient un nombre fini de termes, donc si l'on a une coupure pour une certaine valeur de l'indice n ; a_n s'annule pour une valeur n = N telle que : $\beta - \alpha (2N+1) = 0$, d'où en explicitant β , l'expression de l'énergie à cette coupure :

$$E_N = \hbar \omega_0 (N + \frac{1}{2})$$
 (A2.4)

La série $\phi(q)$ est un polynôme de rang fini N, c'est un polynôme d'Hermite.

(A2.4) montre que, entre deux états de niveaux consécutifs, il y a un écart d'énergie égal à $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ (et non $\hbar\omega_0$), et que le niveau fondamental a une énergie non nulle.

On peut maintenant retrouver les relations d'incertitude pour l'état fondamental de l'oscillateur harmonique, n = 0, donc pour la fonction d'onde $\psi(q) = \psi'(q) = \psi_0 \exp(-\frac{1}{2}\alpha q^2)$:

L'incertitude quadratique moyenne sur l'onde, ou écart-type, est :

$$\Delta q = \sqrt{\langle q^2 \rangle} = \left[\frac{\int q^2 \psi^2(q) \, d \, q}{\int \psi^2(q) \, d \, q} \right]^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}$$

L'amplitude de l'onde pour un mode de nombre d'onde k est la transformée de Fourier de ψ :

$$\widetilde{\psi}(k) = \psi_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha q^2 + ikq\right) dq = \psi_0 \exp\left(-\frac{k^2}{2\alpha}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{\sqrt{\alpha}}{2}q + ik\frac{1}{\sqrt{2\alpha}}\right)^2 dq$$

Changement de variable : $x = \sqrt{\frac{\alpha}{2}} q + i k \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}$ d'où : $\tilde{\psi}(k) = \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \psi_0 e^{-k^2/2\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx$ qui donne :

$$\widetilde{\psi}(k) = \psi_0 \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} \exp\left(-\frac{k^2}{2\alpha}\right)$$
 (A2.5)

(A2.5) montre que la distribution des amplitudes des modes de nombre d'onde k est une fonction de Gauss, comme pour $\psi'(q)$, donc elle a l'incertitude quadratique moyenne : $\Delta k = \sqrt{\langle k^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\alpha}{2}}$. Le produit des deux incertitudes donne : $\Delta q \Delta k = \frac{1}{2}$. Comme la quantité de mouvement p – variable canoniquement conjuguée de q – est donnée par la relation de De Broglie $p = \hbar k$, l'égalité précédente devient pour les ondes traitées ici (oscillateur harmonique) :

$$\Delta q \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad (A2.6)$$

L'égalité (A2.6) est précise dans le cas de l'oscillateur harmonique parce que la distribution de densité de probabilité $|\psi(q)|^2$ est bien définie : c'est une fonction de Gauss.

Mais dans le cas général les relations d'incertitude sont des inégalités : $\Delta q \Delta p \ge \hbar/2$ que nous allons établir à partir du formalisme de la mécanique quantique (principe de correspondance et relations de commutation).

A2.2 – Relations d'incertitude de Heisenberg dans le cas général

Soient A et B deux opérateurs hermitiques quelconques (des observables). La valeur moyenne de leurs grandeurs correspondantes est positive ou nulle. En effet, pour A par exemple :

$$==\int\psi^{*}(AA^{+}\psi)dq=\int(A^{+}\psi)^{*}(A^{+}\psi)dq$$
$$=\int|A^{+}\psi|^{2}dq \ge 0 \quad (A2.7)$$

soit :

Ce résultat permet d'établir des relations entre les valeurs moyennes des grandeurs associées aux observables, qui conduiront aux inégalités de Heisenberg.

On a, par définition de l'opérateur adjoint, quels que soient ψ et ψ' :

$$\int \psi^*(i A \psi') dq = -\int (i A^+ \psi)^* \psi' dq$$

donc: $(iA)^+ = -iA^+$. Il vient donc: $(A+iB)^+ = A^+ - iB^+$. A et B étant hermitiques, et d'après (A2.7), on a pour λ nombre réel :

$$<(A+i\lambda B)(A+i\lambda B)^+>\geq 0$$

et puisque $A^+ = A$ et $B^+ = B$ (hermiticité), l'inégalité précédente devient :

$$<(A+i\lambda B)(A^{+}-i\lambda B^{+})>=<(A+i\lambda B)(A-i\lambda B)>$$
$$=+\lambda^{2}-i\lambda< AB-BA>\geq 0$$

donc <AB – BA> est un nombre imaginaire pur, et l'expression précédente est minimale, tout en restant positive, pour :

$$\lambda = \frac{i}{2} \frac{\langle AB - BA \rangle}{\langle B^2 \rangle}$$

et vaut, pour cette valeur de λ : $<A^2>+\frac{1}{4}\frac{<(AB-BA)^2>}{<B^2>}$

soit : $\langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle \ge -\frac{1}{4} \langle (AB - BA)^2 \rangle$. Les opérateurs A et B ont un écart δA et δB avec leur moyenne : $\delta A = A - \langle A \rangle$ et $\delta B = B - \langle B \rangle$, d'où $\delta A \delta B - \delta B \delta A = AB - BA$ et l'inégalité précédente devient :

$$<(\delta A)^2 > <(\delta B)^2 > \ge -\frac{1}{4} < (A B - B A)^2 >$$
 (A2.8)

Pour des opérateurs conjugués p, q, c'est-à-dire qui vérifient la relation de commutation :

$$[p,q] = pq - qp = -i\hbar$$

(A2.8) donne, avec A = p et B = q:

$$<(\delta p)^2><(\delta q)^2> \ge \left(\frac{\hbar^2}{2}\right)^2$$

d'où pour les écarts quadratiques moyens $\Delta p = \sqrt{\langle (\delta p)^2 \rangle}$ et $\Delta q = \sqrt{\langle (\delta q)^2 \rangle}$, l'inégalité de Heisenberg :

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{\hbar}{2}$$
 (A2.9)

A2.3 – Relation d'incertitude temps-énergie

Les inégalités de Heisenberg, appliquées à tout couple de grandeurs conjuguées p, q (qui ne sont plus nécessairement seulement l'impulsion et la position), expriment que l'on ne peut jamais attribuer simultanément à la particule quantique une valeur rigoureusement précise à la grandeur p et à la grandeur q. Dans le langage de la Mécanique analytique, ce résultat affirme que, dans l'espace de configuration où est décrite la dynamique du système, (p, q), la mesure d'une cellule associée à son action n'est jamais nulle et bornée inférieurement par $\hbar/2$;

D'autre part, le raisonnement effectué au point A2.1 avec l'oscillateur harmonique permet de traduire les inégalités de Heisenberg par le fait que l'extension de l'onde, dans l'espace (q), et l'extension de l'onde dans l'espace (p) ne peuvent jamais devenir simultanément indéfiniment petites. En particulier, lorsque p

est l'impulsion, directement reliée au nombre d'onde k, cela signifie que l'extension de l'onde et celle de

sa transformée de Fourier ne peuvent pas tendre simultanément vers zéro (cf. $\Delta q \Delta k = \frac{1}{2}$).

En mécanique analytique, dans la symétrisation de l'espace de configuration, on peut montrer que le temps t n'est plus considéré comme un paramètre mais comme la grandeur conjuguée de l'énergie, plus exactement de -H (H : hamiltonien) (voir par exemple [8]). C'est une variable, un degré de liberté, au même titre que ceux q. D'ailleurs t et q (en tant que coordonnée) ont un rôle symétrique dans la définition de leur grandeur conjuguée respective l'hamiltonien H et l'impulsion p, puisque :

t a pour conjugué de (- H) :
$$H = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$
 et q a pour conjugué p : $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$

On serait donc tenté d'appliquer directement le raisonnement du point A2.2 au couple (E, t), où E est l'énergie. Malheureusement non, car H et t (en tant qu'opérateur) commutent. Pourtant on peut établir une relation d'incertitude analogue à (A2.9) par le raisonnement physique suivant.

Soit une particule libre d'impulsion $p = \hbar k$ et d'énergie $E = \hbar \omega$ bien déterminées pour une onde plane associée à un mode k. La particule, dans ses différents états modaux, est représentée par la superposition de ses ondes planes dont l'amplitude est la transformée de Fourier de la fonction d'onde :

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \int \widetilde{\psi}(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)/\hbar} d\mathbf{p}$$

On suppose le système unidimensionnel, la coordonnée r se réduisant à q sur une direction, le paquet d'onde correspondant à la superposition des ondes planes ayant une vitesse de groupe v_g . Son extension spatiale est Δq , par conséquent la position du paquet d'onde en un point quelconque de l'axe de propagation est affectée d'une incertitude sur le temps de franchissement de l'ordre de

$$\Delta t \approx \frac{\Delta q}{v_g}$$

d'où une incertitude sur l'impulsion, et par suite sur l'énergie de l'ordre de :

$$\Delta E \approx \frac{\partial H}{\partial p} \Delta p = \dot{q} \Delta p \approx v_g \Delta p$$

Le produit des deux incertitudes donne alors : $\Delta t \Delta E \approx \Delta q \Delta p$; d'où, d'après (A2.9) :

$$\Delta t \Delta E \ge \frac{\hbar}{2}$$
 (A2.10)

(A2.10) signifie ici qu'il existe une incertitude ΔE sur la valeur de l'énergie prise sur une durée Δt liée intrinsèquement à l'évolution dynamique du système. Ce n'est donc pas la même interprétation que pour les grandeurs conjuguées qui vérifient les relations de commutation.

La précision de la mesure de l'énergie d'un système ΔE dépend directement de la durée nécessaire de la mesure Δt qui ne peut jamais être nulle, parce que l'interaction entre deux systèmes quantiques fait intervenir les paquets d'onde qui ont une extension finie.

* *

Annexe 3 : Intégrales de chemin de Feynman

A3.1 – Généralités

Les intégrales de chemin, inventées par R. Feynman en 1965, sont un autre moyen de quantification. S'appuyant sur l'analogie de l'optique ondulatoire, cette méthode attribue à l'onde décrivant une trajectoire reliant deux événements $\mathbf{x}(t_1)$ et $\mathbf{x}(t_2)$ une phase directement reliée à l'action de Hamilton S, ce qui revient à introduire le propagateur reliant l'onde en $\mathbf{x}(t_1)$ et l'onde en $\mathbf{x}(t_2)$:

$$G(\mathbf{x}_{2,}t_{2};\mathbf{x}_{1,}t_{1}) = \int \frac{\mathbf{x}(t_{2})}{\sum_{\mathbf{x}(t_{1})}} D \mathbf{x}(t) \exp(\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x}(t))) \quad (A3.1)$$

où $S = \int L(\mathbf{x}, \mathbf{x}) dt$, L étant le lagrangien et D**x** est un opérateur différentiel qui sera défini plus loin. Cela revient à poser que l'amplitude de la fonction d'onde est la somme des amplitudes des fonctions d'onde des trajectoires possibles reliant les deux points. En conséquence l'action hamiltonienne S n'est pas une fonction unique mais varie avec ces trajectoires. Avec ces conditions, (A3.1) est la conjecture de Feynman ; elle est semblable au principe de Huygens en optique, avec cependant la différence fondamentale que les trajectoires sont dans l'espace de configuration (espace des états) et non dans l'espace géométrique classique 3D.



Richard Feynman au CERN, 1965 (© CERN)

A3.2 – Représentations de Schrödinger et de Heisenberg

Les états quantiques sont décrits par des fonctions d'onde, vecteurs d'un espace de Hilbert (v. par ex. réf. [2]). Or la mesure de ces états, ou observation, est toujours en référence à l'espace géométrique du système de mesure, ou de l'observateur, qui est dit espace de configuration. Celui-ci est défini par les variables dynamiques, position x (ou degrés de liberté) ou moment (impulsion généralisée) p par les-quelles l'état instantané du système quantique est décrit (v. par ex. réf. [8]).

La fonction d'onde sur laquelle agit la mesure est donc la projection de l'état quantique sur l'espace de configuration lié à l'observateur. On dit que l'état quantique fait l'objet d'une représentation dans l'espace de configuration, en référence à l'état position ou à l'état moment, qui doivent alors être exprimés eux aussi comme des éléments de l'espace de Hilbert : notés comme des kets |x > ou |p >, de la même façon que pour les états quantiques |a >. Avec la notation de Dirac, cette projection s'écrit :

$$\psi_a(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | a \rangle$$
 (A3.2a)

pour la représentation avec la variable dynamique position, ou aussi :

$$\phi_a(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | a \rangle$$
 (A3.2b)

pour la représentation avec la variable dynamique moment.

Prenons le cas de la représentation avec $|\mathbf{x} >$ (la transformation en la représentation avec $|\mathbf{p} >$ sera donnée plus loin) :

Poser que $|\mathbf{x} >$ est un vecteur de l'espace de Hilbert des états, revient à poser qu'il est vecteur propre d'un opérateur hermitique associé à la grandeur mesurable position notée X, par le principe de correspondance :

$$[A, H]$$
 (crochet de Poisson) $\rightarrow \frac{1}{i\hbar} [A, H]$ (commutateur des opérateurs) (A3.3)

où A est un opérateur hermitique associé à la grandeur « a » (ou observable), et H l'opérateur hamiltonien, lui aussi hermitique, associé à la grandeur énergie. C'est le postulat n°2 du formalisme de la Mécanique Quantique (dans le formalisme de Dirac, la mécanique quantique repose sur 4 postulats). La projection sur l'espace de configuration est introduite ainsi (pour simplifier on suppose l'espace observateur 1D) :

- hermiticité de l'opérateur X : $X^+ = X$
- les états propres de X sont orthogonaux : $\langle x' | x \rangle = \delta(x' x)$
- et ils sont normalisés : $\int |x|^2 dx < x| = 1$

où δ distribution de Dirac, < x| dual du vecteur |x > de l'espace de Hilbert, et **1** opérateur identité. Un état quantique est décrit dans cette représentation par ses projections sur l'espace de configuration rassemblant toutes les valeurs possibles de x :

$$|a > = \int |x > dx < x|a > = \int |x > dx \psi_a(x)$$
 (A3.4)

c'est la représentation de l'état quantique dans la base orthonormée formée des états propres |x > de X. Avec (A3.4) on retrouve l'expression du produit scalaire de deux états |a > et |a' > :

$$< a' | a >= \int < a' | x > d x < x | a >= \int \psi_a^* (x) \psi_a(x) dx$$
 (A3.5a)

et en particulier la norme d'un état |a > :

$$||a||^2 = \langle a|a \rangle = \int \psi_a^*(x)\psi_a(x)dx$$
 (A3.5b)

De l'équation aux valeurs propres $X|x \ge x|x \ge x$ on obtient que l'opérateur position X est diagonale dans sa représentation, c'est-à-dire sa matrice dans la base $|x \ge x|$ est diagonale :

$$\langle x'|X|x \rangle = x \delta(x'-x)$$

et l'on déduit que tout opérateur Y = f(X) qui s'exprime avec X l'est aussi :

$$< x' | f(X) | x > = f(x) \delta(x' - x)$$
 (A3.6)

en faisant bien la distinction suivante : f(X) est la fonction où la variable est l'opérateur X, et f(x) la fonction où la variable x est la valeur propre de X, donc une fonction sur les nombres réels.

Une mesure de la grandeur associée à l'observable A donne, selon le formalisme quantique, la valeur moyenne de cet observable. De ce qui précède, on déduit qu'elle est :

$$==\int \psi_{a}^{*}\(x\)A\(x\)\psi_{a}\(x\)dx$$
 (A3.7)

Remarque : (A3.7) utilise la condition de normalisation à l'unité où (A3.5b) est égale à 1 :

$$||a||^2 = \langle a|a \rangle = \int \psi_a^*(x)\psi_a(x)dx = 1$$

puisque, selon le formalisme quantique, la quantité $\psi_a^*\psi_a = \rho_a = |\psi_a(x)|^2$ est la densité de probabilité de l'état quantique |a >, avec donc $\int \rho_a(x) dx = 1$. Pourtant, en mécanique quantique la valeur moyenne ne s'écrit pas $\int \rho_a(x) A(x) dx$, comme c'est le cas en mécanique classique, mais elle s'écrit (A3.7). Comme l'a fait remarquer I. Prigogine, dans [24], le formalisme de la mécanique statistique classique est fondamentalement différent de celui de la mécanique quantique par cette définition de la moyenne d'une grandeur : en mécanique classique elle entraîne que l'équation de Liouville y est

applicable, alors qu'elle ne l'est pas en mécanique quantique.

Montrons que l'équation de Schrödinger indépendante du temps, qui est l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien, est obtenue à partir des résultats précédents lorsque A = H :

■ Proposition :

L'équation de Schrödinger indépendante du temps décrit la projection sur l'espace de configuration lié à l'observateur (ou à la mesure), à un instant donné, d'un état quantique, lorsqu'on lui applique la mesure de son énergie :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi_a(x,t) = E\psi_a(x,t) \quad (A3.8)$$

où E valeur propre de l'hamiltonien, c'est-à-dire l'énergie $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, V(x) étant l'énergie poten-

tielle du champ éventuel dans lequel le système quantique mesuré (ex. : particule) est placé.

Preuve de (A3.8) :

On se place dans un espace de configuration 1D. L'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien est indépendante du temps, plus exactement est prise à chaque instant (état stationnaire d'énergie) :

$$H \mid a > = E \mid a >$$

où l'opérateur hamiltonien est, d'après le principe de correspondance $p_x \rightarrow p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$:

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + V(x) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

La projection de l'équation aux valeurs propres sur l'espace de configuration (x) donne alors :

$$< x |H|a> = \frac{\hbar^2}{2m} < x |-\frac{\partial^2}{\partial x^2}|a> + < x |V(x)|a>$$

et compte tenu de (A3.6) :

$$< x| - \frac{\partial^2}{\partial x^2} |a\rangle = \int

$$< x|V(x)|a\rangle = \int$$$$

d'où :

$$< x | H | a > = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi_a(x) = E \psi_a(x)$$

CQFD de (A3.8).

Si l'état quantique est dans la représentation par la projection sur l'espace des moments (p), son équation d'évolution de Schrödinger (équation aux valeurs propres de H) est différente de (A3.8) ; elle devient :

$$\frac{P^2}{2m}\phi_a(p) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int V(p'-p)\phi_a(p')dp' = E\phi_a(p) \quad (A3.9)$$

Preuve de (A3.9) :

©Frédéric Élie – <u>http://fred.elie.free.fr</u>, avril 2021

Comme pour la position, on pose pour le moment p les propriétés :

- hermiticité : $P^+ = P$ _
- observable associé : $P = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ _
- _
- normalité : $\int |p > d p < p| = 1$ _

On détermine d'abord la relation entre les projections $\psi_a(x) = \langle x | a \rangle$ et $\phi_a(p) = \langle p | a \rangle$; d'après (A3.4) où l'on remplace |a > par |p' >, $|p' > = \int |x' > dx' < x'| p' >$, l'équation aux valeurs propres de P devient :

$$P \mid p' \ge = p' \mid p' \ge = -i\hbar \int |x' \ge dx' \frac{\partial}{\partial x'} < x' \mid p' \ge$$

d'où :

$$< x'' | P | p'> = p' < x'' | p'> = -i\hbar \int < x'' | x'> dx' \frac{\partial}{\partial x'} < x' | p'>$$

D'après l'orthogonalité des vecteurs propres :

$$< x'' | x' > = \delta(x'' - x')$$

l'expression précédente donne :

$$p' < x' | p' > = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} < x' | p' >$$

qui est une équation différentielle de la fonction <x'|p'>, de solution :

$$\langle x' | p' \rangle = c(p') \exp(\frac{i}{\hbar} p' x')$$

où c(p') est déterminé en utilisant la propriété d'orthonormalité :

$$< p''|p'> = \delta(p''-p') = c^{*}(p'')c(p')\int \exp(\frac{i}{\hbar}(p'-p'')x')dx$$

or: $\int \exp(\frac{i}{\hbar}(p'-p'')x')dx' = 2\pi\delta(p'-p'')$ d'où: $c(p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, donc:
 $< x'|p'> = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(\frac{i}{\hbar}p'x')$ (A3.10)

que l'on utilise dans :

$$\phi_a(p) = = \int d x < x | a >$$

par $= < x | p>^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{i}{\hbar} p x)$ et avec $\psi_a(x) = < x | a>$, d'où : $\phi_a(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p x\right) \psi_a(x) dx \quad \text{(A3.11)}$

(A3.11) exprime que les deux projections sont transformées de Fourier l'une de l'autre. Équation de Schrödinger pour la fonction d'onde dans la projection sur l'espace (p) observateur :

$$= E = E \phi_a(p) = +$$

D'après l'équation aux valeurs propres de P on a :

$$= = \frac{p^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \phi_a(p)$$

le terme avec le potentiel s'écrit, en utilisant (A3.11) et (A3.6) :

$$= \iiint d x < x | V| x' > d x' < x' | p' > d p' < p' | a >$$

$$= \iint \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p x\right) V(x) \delta(x-x') d x' \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p' x'\right) d p' \phi_a(p')$$

$$= \frac{1}{2\pi} \iint \exp\left(\frac{i}{\hbar} (p'-p) x\right) V(x) \phi_a(p') d p' d x$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int V(x) \exp\left(\frac{i}{\hbar} (p'-p) x\right) d x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \phi_a(p') d p'$$

la première intégrale est la transformée de Fourier de V(x) :

$$V(p'-p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int V(x) \exp(\frac{i}{\hbar} (p'-p)x) dx$$

soit :

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int V(p'-p) \phi_a(p') dp'$$

finalement puisque p² est valeur propre de P² :

$$= E \phi_a(p) = \frac{P^2}{2m} \phi_a(p) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int V(p'-p) \phi_a(p') dp'$$

CQFD de (A3.9).

Il existe deux façons de considérer la projection de l'état quantique sur l'espace de configuration de l'observateur, ce qui entraîne deux façons de définir $\psi_a(x) = \langle x | a \rangle$:

Selon la description de Schrödinger :

Les états quantiques évoluent avec le temps et les opérateurs (observables) A sont indépendants du temps, c'est-à-dire A dépend du temps seulement de manière explicite et non par l'intermédiaire des variables dynamiques q_k qu'il contient, celles-ci étant donc indépendantes du temps :

$$A = A(q_k, t) \text{ avec } \frac{d q_k}{d t} = 0 \rightarrow \frac{d A}{d t}(q_k, t) = \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_k \frac{\partial A}{\partial q_k} \frac{d q_k}{d t} = \frac{\partial A}{\partial t}(q_k, t) \quad (A3.12)$$

.

Les états quantiques évoluent avec le temps :

$$|a,t>=U(t,t_0)|a,t_0>$$
 (A3.13)

où l'opérateur d'évolution $U(t,t_0)$ est donné en (4.6) (chap. 4), tandis que l'espace de configuration de l'observateur est supposé fixé dans l'état |x >, on a donc :

$$\psi_a(x,t) = \langle x | a, t \rangle$$
 (A3.14)

L'évolution des états est décrite par l'équation de Schrödinger dépendant du temps :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a, t\rangle = H(t) |a, t\rangle$$
 (A3.15)

dont la projection sur l'espace de configuration observateur, avec |x > fixé, compte tenu de (A3.14), est :

$$i\hbar \frac{\partial \psi_a(x,t)}{\partial t} = H(x)\psi_a(x,t)$$
 (A3.16)

On remarque que si l'hamiltonien H ne dépend pas explicitement du temps (système conservatif), c'està-dire si $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$, (A3.16) donne l'équation de Schrödinger indépendante du temps, qui est l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien (A3.8).

La conséquence de (A3.15) sur l'évolution des valeurs moyennes d'une grandeur A, définies par (A3.7), est :

$$\frac{d < A(t)>}{dt} = -\frac{i}{\hbar} < [A, H]> + < \frac{\partial A}{\partial t} > \quad (A3.17)$$

Ainsi, une observable qui ne dépend pas explicitement du temps, $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$ comme c'est le cas, par exemple de l'observable position X dont la moyenne est la position mesurée x = < X >, correspond à une grandeur mesurée stationnaire si A commute avec l'hamiltonien H :

$$\frac{d < A(t)>}{dt} = -\frac{i}{\hbar} < [A, H] > = 0 \quad \text{si} \quad [A, H] = 0$$

La figure (A3.1a) représente la description de Schrödinger.



figure A3.1 : représentation de Schrödinger et représentation de Heisenberg

Selon la description de Heisenberg :

Les états quantiques |a > sont supposés indépendants du temps, leur évolution s'effectue par l'intermédiaire de l'opérateur évolution U(t,t₀), qui intervient dans l'évolution de l'observable A, donnant au temps t une observable Â(t). L'état quantique étant indépendant du temps, on le fixe, et on le note $|\hat{a} >$, pour l'instant t₀, et à partir de (A3.13) on l'exprime en fonction de l'état |a,t >:

$$|a,t\rangle = U(t,t_0)|a,t_0\rangle \rightarrow |a\rangle = |a,t_0\rangle = U(t_0,t)|a,t\rangle = U^{-1}(t,t_0)|a,t\rangle = U^{+}(t,t_0)|a,t\rangle = U^{+}(t,t_0)|a,t\rangle = U^{-1}(t,t_0)|a,t\rangle = U^{-1}(t,t)|a,t\rangle = U^{-1}(t,t)|a,t\rangle = U^{-1}(t,t)|a,t\rangle = U^{-1}(t,t)|a,t\rangle = U$$

puisque $U^{-1} = U^+$. La moyenne de la grandeur associée l'observable A est donc :

 $<A>=<a,t|A|a,t>=<\hat{a}|\hat{A}(t)|\hat{a}>=<\hat{a}|U^{+}(t,t_{0})AU(t,t_{0})|\hat{a}>$

d'où l'évolution dans le temps de l'observable :

$$\hat{A}(t) = U^{+}(t, t_{0}) A U(t, t_{0})$$
 (A3.18)

Une conséquence de (A3.18) est que, pour l'opérateur position, son évolution avec le temps est :

$$\hat{X}(t) = U^{+}(t, t_{0}) X U(t, t_{0})$$
 (A3.18bis)

Les opérateurs de la description de Heisenberg et de la description de Schrödinger A sont reliés par (A3.18). En utilisant (A3.18) et (A3.12) on obtient l'équation d'évolution de en relation avec l'hamiltonien seul, sans passer par A :

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \quad (A3.19)$$

où l'hamiltonien dans la description de Heisenberg est égal à l'hamiltonien de la description de Schrödinger, puisque dH/dt = ∂ H/ ∂ t :

$$\hat{H} = H$$
 (A3.20)

De (A3.18bis) on déduit que les opérateurs position de la description de Schrödinger X et de la description de Heisenberg \hat{X} ont mêmes valeurs propres, en effet :

$$\begin{aligned} \hat{X}(t) | \hat{x} > &= U^{+}(t, t_{0}) X U(t, t_{0}) | \hat{x} > &= U^{+}(t, t_{0}) X U(t, t_{0}) | x, t_{0} > \\ &= U^{+}(t, t_{0}) X | x, t > &= \hat{x} | x, t_{0} > \end{aligned}$$

et puisque $U^{-1} = U^+$, on a :

$$U(t,t_0)\hat{X}(t)|\hat{x}\rangle = X|x,t\rangle = \hat{x}U(t,t_0)|x,t_0\rangle = \hat{x}|x,t\rangle$$
(A3.21)

soit :

$$\hat{x} = x$$
 (A3.21bis)

Dans la représentation de Heisenberg la projection de l'état sur l'espace de configuration, où la position dépend du temps, est la fonction d'onde :

$$\hat{\psi}_{a}(x,t) = \langle x,t | a \rangle$$
 (A3.22)

Puisque dans cette représentation l'évolution avec le temps provient de l'évolution de la configuration observateur <x,t |, et non de l'état |a >, (A3.15) et (A3.16) sont remplacées respectivement par :

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} < x, t \mid = < x, t \mid H(t)$$
 (A3.23)
$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}_{a}(x, t) = H(t)\hat{\psi}_{a}(x, t)$$
 (A3.24)

où l'on a utilisé (A3.20).

Les fonctions d'onde de Schrödinger et de Heisenberg, solutions de (A3.16) et (A3.24), sont directement reliées par renversement du temps. En effet, on a :

$$\psi_a(t) = \langle x | a, t \rangle = \langle x, -t | a \rangle = \hat{\psi}_a(x, -t)$$
 (A3.25)

Les deux descriptions sont ainsi équivalentes : dans l'une l'évolution dans le temps est relative à l'observateur mobile par rapport à l'état quantique à mesurer fixe (Heisenberg), dans l'autre elle est relative à l'état quantique à mesurer mobile par rapport à la configuration fixe de l'observateur (Schrödinger). La méthode des intégrales de chemin de Feynman ci-après s'applique de la même façon aux deux descriptions, il faudra juste prendre en compte (A3.25) pour passer de l'une à l'autre. Dans ce qui suit, on utilise la description de Heisenberg.

A3.3 – Description de l'évolution des états quantiques par les intégrales de chemin de Feynman

L'évolution d'un état quantique, projeté sur l'espace de configuration observateur mobile par rapport à l'état quantique considéré comme fixé, fait intervenir un propagateur qui permet de relier les fonctions d'onde à l'instant initial t₀ sur tous les points possibles de l'espace observateur, aux fonctions d'onde à un instant t > t₀ sur tous les points possibles de l'espace à cet instant :

$$\hat{\psi}_a(x,t) = \int G(x,t;x_0,t_0) \hat{\psi}_a(x_0,t_0) dx_0$$
 (A3.26)

où $\hat{\psi}_a(x_0, t_0) = \langle x_0, t_0 | a \rangle$ et $\hat{\psi}_a(x, t) = \langle x, t | a \rangle$ sont respectivement l'état initial et l'état à l'instant t, G est le propagateur entre ces deux états. Comme en optique ondulatoire, (A3.26) exprime que la connaissance de l'état d'une onde en (x,t) dépend de l'état de l'onde à un instant initial sur tous les points de l'espace (principe de Huyghens) ; mais en mécanique quantique, ce principe s'applique à l'espace de configuration observateur défini par (x) ou par (p), sur lequel est projeté l'état quantique, ce qui s'exprime par le principe de non-séparabilité.

Comme, avec (A3.4), on a aussi : $\hat{\psi}_a(x,t) = \langle x, t | a \rangle = \int \langle x, t | x_0, t_0 \rangle dx_0 \langle x_0, t_0 | a \rangle$, (A3.26) permet de définir le propagateur par :

$$G(x,t;x_{0,}t_{0}) = \langle x,t | x_{0},t_{0} \rangle = \langle x,t | a \rangle \langle a | x_{0},t_{0} \rangle = \hat{\psi}_{a}(x,t)\hat{\psi}_{a}^{*}(x_{0},t_{0}) \quad (A3.27)$$

où l'on a utilisé la condition de normalisation des vecteurs propres :

$$|a>< a|=1 | < a|a>=1$$
 (A3.28)

Si H ne dépend pas explicitement du temps (système conservatif), (A3.24) a comme solution en x :

$$\hat{\psi}_{a}(x,t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}H(t-t_{0})\right)\hat{\psi}_{a}(x,t_{0}) \quad (A3.29)$$

ou encore d'après (A3.23) :

$$\langle x, t \rangle = \langle x, t_0 \rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H\right)$$
 (A3.30)

qui, appliqué à (A3.27), donne :

$$G(x,t;x_0,t_0) = < x,t | x_0,t_0 > = < x | \exp\left(\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H\right) | x_0 >$$
 (A3.31)

Remarque : Puisque l'hamiltonien s'exprime en fonction des variables canoniques (x,p), on peut faire apparaître dans (A3.31) la description par la projection sur l'espace des moments (p) (A3.11) en décomposant l'intégrale qui intervient dans le produit scalaire comme suit :

$$G(x,t;x_0,t_0) = \int \langle x | p \rangle d p \langle p | \exp(\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H) | p' \rangle d p' \langle p' | x_0 \rangle$$
(A3.32)

(A3.10) donne :

$$< x | p > = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right)$$

$$< p' | x_0 > = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p' x_0\right)$$
 (A3.32bis)

que l'on remplace dans (A3.32).

Par exemple, pour une particule libre l'hamiltonien se réduit à son énergie cinétique $H = \frac{p^2}{2m}$ ce qui donne avec (A3.32) et (A3.32bis), après intégration :

$$G(x, t_0 + \Delta t; x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp\left(\frac{i m (x - x_0)^2}{2\hbar \Delta t}\right) \quad (A3.33)$$

où $\Delta t = t - t_0$.

Si la position et l'instant finaux (x,t) sont très proches de la position et instant initiaux (x₀,t₀), avec comme variations Δt et $\Delta x = x - x_0$ alors $\Delta x/\Delta t = v$ est la vitesse de déplacement de la particule libre, et (A3.33) devient :

$$G(x_0 + \Delta x, t_0 + \Delta t; x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp\left(i m \frac{v^2}{2\hbar} \Delta t\right) \quad (A3.34)$$

Les résultats (A3.33) et (A3.34) interviennent dans la décomposition d'un propagateur quelconque en propagateurs reliant des états intermédiaires en nombre arbitrairement grand, puisque l'on peut toujours écrire en projetant sur l'espace de configuration (x) :

$$G(x,t;x_{0},t_{0}) = \langle x,t | x_{0},t_{0} \rangle$$

= $\int \langle x,t | x_{n-1},t_{n-1} \rangle dx_{n-1} \langle x_{n-1},t_{n-1} | x_{n-2},t_{n-2} \rangle dx_{n-2} \dots dx_{1} \langle x_{1},t_{1} | x_{0},t_{0} \rangle$ (A3.35)

où les propagateurs intermédiaires sont :

$$G(k+1;k) = \langle x_{k+1}, t_{k+1} | x_k, t_k \rangle = \langle x_{k+1} | \exp(\frac{i}{\hbar} \delta t H) | x_k \rangle$$
 (A3.36)

avec $\delta t = t_{k+1} - t_k$ devenant arbitrairement petit ; en projetant sur l'espace des moments (p) le propagateur intermédiaire est :

$$G(k+1;k) = \langle x_{k+1}, t_{k+1} | x_k, t_k \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_k \exp \frac{i\,\delta t}{\hbar} \left[p_k \frac{x_{k+1} - x_k}{\delta t} - H(p_k, \frac{x_{k+1} + x_k}{2}) \right]$$
(A3.37)

(A3.35), (A3.36), (A3.37) reviennent à effectuer une discrétisation de l'évolution du système quantique, au moyen d'évolutions intermédiaires, ou chemins, reliant des états intermédiaires arbitrairement proches.

Cela permet aussi d'envisager l'existence d'états virtuels intermédiaires sous la condition de compatibilité de l'intervalle de temps ōt avec la masse, ou l'énergie requises de la particule virtuelle, exigée par les relations d'incertitude de Heisenberg.

Entre deux états (x,t) et (x₀,t₀) séparés par un intervalle fini, qui contient un nombre arbitrairement grand d'évolutions intermédiaires, l'application de (A3.37) pour chacun d'eux conduit au produit :

$$G(x,t;x_0,t_0) = \int \frac{d p_1}{2\pi\hbar} \frac{d p_2}{2\pi\hbar} \dots \frac{d p_{n-1}}{2\pi\hbar} \int dx_1 dx_2 \dots dx_{n-1} \exp \frac{i\,\delta t}{\hbar} \sum_k \left[\frac{x_{k+1} - x_k}{\delta t} p_k - H(p_k, \frac{x_{k+1} + x_k}{2}) \right]$$

On introduit l'opérateur différentiel :

$$Dx = \lim_{\substack{n \to \infty \\ \delta t \to 0}} \prod_{k=0}^{n} \frac{dx_k}{A_k} \quad (A3.38)$$

où Ak est tel que pour une particule libre on retrouve (A3.33) ou (A3.34), ce qui donne :

$$Dx = \lim_{\substack{n \to \infty \\ \delta t \to 0}} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\delta t} \right)^{\frac{n-1}{2}} dx_1 \dots dx_n \quad (A3.39)$$

Comme dans (A3.34) le terme qui apparaît dans l'exponentiel est une action hamiltonienne, on généralise cette situation par la conjecture de Feynman ; elle consiste à poser que les propagateurs intermédiaires entre tout état k et l'état (x,t) comportent une phase assimilée à l'action hamiltonienne :

$$G(x,t;x_k,t_k) = \int_{x_k,t_k}^{x,t} Dx(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(x(t))\right) \quad (A3.40)$$

où Dx est donnée en (A3.39). Ce principe est analogue au principe de Huyghens en optique ondulatoire, où la phase de l'onde est directement reliée à l'action hamiltonienne.

Selon cette conjecture, le propagateur entre deux états consécutifs k et k-1 est :

$$\langle x_k, t_k | x_{k-1}, t_{k-1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\Delta t}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(k,k-1)\right)$$
 (A3.41)

où, pour une particule soumise à un potentiel d'interaction V, la variation de l'action hamiltonienne entre les deux états est :

$$S(k, k-1) = \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)\right) dt = \Delta t \left[\frac{1}{2}m\left(\frac{x_k - x_{k-1}}{\Delta t}\right)^2 - V\left(\frac{x_k + x_{k-1}}{2}\right)\right]$$
(A3.42)

Le formalisme des intégrales de chemins de Feynman est cohérent avec l'équation d'onde de Schrödinger. Plus précisément, on a :

■ Proposition :

Les intégrales de chemin de Feynman (A3.26), où le propagateur, suite à la conjecture de Feynman, est exprimé par (A3.41) et (A3.42), permettent de retrouver l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\hat{\psi}_a}{\partial x^2} + V(x,t)\hat{\psi}_a(x,t) = i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}_a(x,t)}{\partial t} \quad (A3.43)$$

celle-ci n'étant alors plus qu'une approximation d'ordre 1 appliquée à ces intégrales.

Preuve de (A3.43) :

Soit l'intégrale de chemin (A3.26) entre (x_0,t_0) et (x,t) avec t = $t_0 + \delta t$:

$$\hat{\psi}_{a}(x,t_{0}+\delta t) = \int G(x,t_{0}+\delta t;x_{0},t_{0}) \hat{\psi}_{a}(x_{0},t_{0}) dx_{0}$$

où l'on applique (A3.41) et (A3.42) au propagateur G(x, $t_0 + \delta t$; x_0 , t_0), ce qui donne, en posant la variation de position $\delta x = x - x_0$:

$$G(x, t_0 + \delta t; x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\delta t}} \exp\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2\delta t}\delta x^2 - \delta t V\left(\frac{2x_0 + \delta x}{2}, t_0\right)\right)$$

que l'on développe en série en δx , ce qui donne :

$$\hat{\psi}_{a}(x,t_{0}+\delta t) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\delta t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{im\delta x^{2}}{2\hbar\delta t}\right) \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta t V + \dots\right) \left(\hat{\psi}_{a}(x,t_{0}) - \delta x \frac{\partial\hat{\psi}_{a}}{\partial x} + \frac{\delta x^{2}}{2} \frac{\partial^{2}\hat{\psi}_{a}}{\partial x^{2}} + \dots\right) d\delta x$$

et comme on a au premier ordre en δt :

$$\hat{\psi}_a(x,t_0+\delta t) = \hat{\psi}_a(x,t_0) + \delta t \frac{\partial \hat{\psi}_a(x,t_0)}{\partial t_0} + \dots$$

l'égalité donne, après calcul de l'intégrale qui intervient dans le second membre :

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}_a(x,t_0)}{\partial t_0} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \hat{\psi}_a}{\partial x^2} + V(x,t_0) \hat{\psi}_a(x,t_0)$$

qui est (A3.43) lorsque t_0 varie. CQFD de (A3.43).

Remarque :

Avec les intégrales de chemin de Feynman, l'évolution d'une particule massive en présence d'un potentiel gravitationnel dépend de sa masse. Ce résultat diffère donc de celui de la mécanique classique où, suite à l'égalité de la masse grave et de la masse inerte, une particule dans un champ de pesanteur rigoureusement isolé de toute perturbation (frottements, résistance, interactions avec d'autres masses...) évolue selon des états indépendants de sa masse.

On le montre avec un potentiel de pesanteur V = mgz utilisé dans (A3.41) et (A3.42) :

$$< x_{k}, t_{k} | x_{k-1}, t_{k-1} > = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\delta t}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_{k-1}}^{t_{k}} (\frac{1}{2}m\dot{x}^{2} - mgz)dt\right]$$
 (A3.44)

où l'on voit que la masse m intervient, sans pouvoir être éliminée, dans le déphasage de la fonction d'onde porté par l'action hamiltonienne (terme en exp $i/\hbar(...)$).

Cet effet a été observé expérimentalement : des neutrons thermiques émis par une même source, séparés sur deux trajets contenus dans un même plan vertical, se rejoignent en un même détecteur par l'action de réflecteurs. Soient φ_1 et φ_2 les phases des fonctions d'onde ψ_1 et ψ_2 des neutrons parcourant les trajets 1 et 2 respectivement. On montre que, au niveau du détecteur, ces phases présentent un écart égal à :

$$\varphi_1 - \varphi_2 = -\frac{m^2 g}{\hbar^2} L_1 L_2 \lambda_C \sin \theta$$

où L₁, L₂ longueurs parcourues respectivement dans les trajets 1 et 2, $\lambda_C = \hbar/mv$ longueur d'onde de Compton, v vitesse des neutrons (fournie par la source thermique), θ incidence entre les deux faisceaux à leur rencontre au niveau du détecteur. La fonction d'onde résultante $\psi = \psi_1 + \psi_2$ aura donc un terme de déphasage : $\psi = \psi_1 + \psi_2 = \psi_1 (1 + \exp i(\phi_1 - \phi_2))$, causant des figures d'interférences portées par $|\psi|^2$. Si l'on néglige la constante de Planck, $\hbar \rightarrow 0$, on se retrouve dans le cas de la mécanique classique et l'amplitude de la somme des deux ondes ne contient plus de déphasage : les figures d'interférences disparaissent.
Références :

[1] Bertrand Duplantier: *Introduction à l'effet Casimir*, séminaire Poincaré (Paris, 9 mars 2002), publié dans (: en) Bertrand Duplantier et Vincent Rivasseau, Poincaré Seminar (Paris, 9 mars 2002) : vacuum energy renormalization, Basel Boston, Birkhäuser Verlag, 2003

[2] Edgard Elbaz : Quantique, Ellipses, 1995

[3] A. Messiah : Mécanique quantique, tome 2, Dunod, 1964

[4] Patrick Peter et Jean-Philippe Uzan : Cosmologie primordiale, Belin, 2005

[5] Frédéric Élie : Quaternions et rotations en mécanique quantique, site http://fred.elie.free.fr, juin 2020

[6] Frédéric Élie : Spineurs et algèbre vectorielle en physique quantique : application à l'équation de Dirac, site <u>http://fred.elie.free.fr</u>, octobre 2017

[7] Richard Feynman : Leçons sur la gravitation (1995), éd. Odile Jacob, 2001

[8] Alphonse Charlier, Alain Bérard, Marie-France Charlier : *Mécanique analytique, du Cours aux Travaux Dirigés*, Ellipses, 1989

[9] Calphysics Institute : Introduction to Zero-Point Energy, avril 2008, http://calphysics.org/zpe_fr.html

[10] Jean-Pierre Luminet : L'écume de l'espace-temps, Odile Jacob, sciences, octobre 2020

[11] R. L. Jaffe : The Casimir Effect and the Quantum Vacuum, MIT-CTP-3614, arXiv:hep-th/0503158v1 21 Mars 2005

[12] François-Xavier Dezael : L'effet Casimir dynamique et son lien avec l'amplification paramétrique en optique quantique, Thèse de doctorat de l'Université Paris VI, soutenue le 25 juin 2007

[13] Roger Balian : Casimir Effect and Geometry, Séminaire Poincaré 1 (2002) 1-22 © Birkhäuser Verlag, Basel, 2002

[14] Guy Chanfray, Gérard Smadja : Les particules et leurs symétries, Masson, 1997

[15] Alain Aspect, *Quelques tests expérimentaux des fondements de la mécanique quantique (en optique)*, dans Yves Michaux, Qu'est-ce que l'Univers ?, Odile Jacob, coll. « Université de Tous les Savoirs » (no 4), 2001 (ISBN 2-7381-0917-9), p. 589

[16] Roland Omnès, Comprendre la mécanique quantique, EDP Sciences, 2000

[17] Philippe Cristofari, Frédéric Élie, Colette Garaventa : *Interprétation de la physique quantique : La physique quantique est-elle une théorie complète ?* juin 1980 - <u>http://fred.elie.free.fr</u>

[18] Robert Zitoun : Introduction à la physique des particules, Dunod, 2000

[19] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet: Physique statistique - Hermann 2001

[20] H. Georgi : Lie Algebras in Particle Physics, Westview Press, 1999

[21] Frédéric Élie : Liaison hydrogène et autres liaisons chimiques - site http://fred.elie.free.fr , août 2004

[22] Mathieu Grousson: *LHC : dix ans après, l'aventure continue !* Publié sur CNRS Le journal (<u>https://lejournal.cnrs.fr</u>) 27.03.2020, <u>https://lejournal.cnrs.fr/articles/lhc-dix-ans-apres-laventure-continue</u>

[23] Gilles Cohen-Tannoudji : La longue traque du boson de Higgs, 5 mai 2012, www.gicotan.fr

[24] Prigogine Ilya : Les lois du chaos - Flammarion, 1994

[25] Frédéric Élie : Le fond diffus cosmologique (CMB) – site http://fred.elie.free.fr , février 2021

[26] Roger H. Koch, D. J. Van Harlingen, John Clarke: Measurements of quantum noise in resistively shunted

Josephson junctions, Phys. Rev. B 26, 74 – Published 1 July 1982 https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.26.74

[27] Thomas Boisson : Que sont les fluctuations quantiques du vide ? Trust My Science, 6 septembre 2017 <u>https://trustmyscience.com/les-fluctuations-quantiques-du-vide/</u>

[28] C.Genet : La force de Casimir entre deux miroirs métalliques à température non nulle. Thèse de doctorat, Université de Paris VI. (Juillet 2002)

[29] P. W. Milonni, R. J. Cook, M. E. Goggin : *Radiation pressure from the vacuum : Physical interpretation of the Casimir force*. Phys. Rev. A. 38, 1621 (1988)

[30] G. Bressi, G. Carugno, R. Onofrio et G. Ruoso : *Measurement of the Casimir force between parallel metallic surfaces*. Phys. Rev. Lett. 88, 041804 (2002)

[31] R.S. Decca, D. Lopez, E. Fischbach et D.E. Krause : *Measurement of the Casimir force between dissimilar metals*. Phys. Rev. Lett, 91, 050402-1 (2003)

[32] C.Genet, F. Intravaia, A. Lambrecht, S. Reynaud : *Electromagnetic Vaccuum fluctuations, Casimir and Van der Waals Forces*. Annales de la fondation Louis de Broglie. 29, 311 (2004)

[33] M-T. Jaekel, S. Reynaud : *Movement and fluctuations of the vacuum*, 1997 Rep. Progr. Phys. 60 863 [quant-ph/9706035] - <u>https://arxiv.org/abs/quant-ph/9706035v1</u>

[34] A. Lambrecht, M-T. Jaekel, S. Reynaud, *Motion Induced Radiation from a Vibrating Cavity,* Phys. Rev. Lett. 77, 615 – Published 22 July 1996

[35] Groupe Laser Interferometer Gravitational-wave Observatory (LIGO) : Quantum correlations between the light and kilogram-mass mirrors of LIGO, arXiv:2002.01519v1 [quant-ph] 4 Feb 2020

[36] Benea-Chelmus, IC., Settembrini, F.F., Scalari, G. et al. *Electric field correlation measurements on the electromagnetic vacuum state*. Nature 568, 202–206 (2019). <u>https://doi.org/10.1038/s41586-019-1083-9</u>

[37] Kara Manke : *Heat energy leaps through empty space, thanks to quantum weirdness*, Berkeley News, 11 décembre 2019, <u>https://news.berkeley.edu/2019/12/11/heat-energy-leaps-through-empty-space-thanks-to-quantum-weirdness/</u>

[38] Fong, K.Y., Li, HK., Zhao, R. et al. *Phonon heat transfer across a vacuum through quantum fluctuations*. Nature 576, 243–247 (2019). <u>https://doi.org/10.1038/s41586-019-1800-4</u>

[39] K. Scharnhorst: *The velocities of light in modified QED vacua*, Annalen Phys.7:700-709,1998 – site: <u>https://arxiv.org/abs/hep-th/9810221</u>

[40] S. Reynaud, A. Heidmann, E. Giacobino, C. Fabre : *Quantum Fluctuations in Optical Systems*, Progress in Optics, Volume 30, 1992, Pages 1-85 - <u>https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0079663808700969</u>

[41] C. Longuemare : Le Lamb shift, séminaire d'analyse Univ. de Caen, année 2005-2006, 25 avril 2006 - <u>https://clong.pagesperso-orange.fr/semana/documents/longuemare/Lambshift.pdf</u>

[42] Sandrine Galtier : Spectroscopie haute précision de la transition 1S-3S de l'atome d'hydrogène en vue d'une détermination du rayon du proton. Thèse de doctorat, Laboratoire Kastler Brossel, Univ. Paris 6, 22 septembre 2014

[43] W. E. Lamb and R. C. Retherford, Phys. Rev. 72 (1947) 241

[44] H. A. Bethe : The electromagnetic shift of energy levels, Phys. Rev. 72 (1947) 339-341

[45] T. A. Welton : Some observable effects of the quantum-mechanical fluctuations of the electromagnetic field. Phys. Rev., 74(9) :1157-1167, Nov 1948.

[46] Stephen W. Hawking : *Une brève histoire du temps, du Big Bang aux trous noirs*, éd. Flammarion, 2020 (première édition Bantam Press, New York, 1988)

[47] Stephen W. Hawking : Particle creation by black holes, Comm. Math. Phys. 43(1975),199

[48] Stephen Hawking et Roger Penrose : La nature de l'espace et du temps, éd. Gallimard, 1997

[49] Bekenstein, J. 1973, Black holes and entropy, Phys. Rev. D7, 2333-46

[50] Sudipta Sarkar : *Black hole thermodynamics : General relativity and beyond*, arXiv:1905.04466v1 [hep-th] 11 may 2019

[51] Pierre Vanhove : *Les mystérieux trous noirs : les trous noirs quantiques*, conférence organisée par la Société Astronomique de France (SAF), 13 octobre 2018, site <u>www.planetastronomy.com/special/2019-special/</u>

[52] Steven B. Giddings : The black hole information paradox, arXiv : hep-th/9508151v1 28 aug 1995

[53] Thibault Damour : The entropy of black holes : a primer, arXiv:hep-th/0401160v1 22 jan 2004

[54] James M. Bardeen, Brandon Carter, Stephen Hawking: *The four laws of black holes mechanics*, Communications in Mathematical Physics, 31, 161-170(1973)

[55] Andrew Strominger and Cumrun Vafa : *Microscopic origin of the Bekenstein-Hawking entropy*, Physics Letters B379,99-104 (1996)

[56] Samir D. Mathur : What exactly is the information paradox ? ArXiv:0803.2030v1 [hep-th] 13 mar 2008

[57] John Preskill : Do black holes destroy information ? ArXiv:hep-th/9209058v1 16 sep 1992

[58] James B. Hartle : *Generalized quantum theory in evaporating blacl hole spacetimes*, arXiv:gr-qc/9705022v5 2 nov 1997

[59] U. Mohideen, A. Roy : Phys. Rev.Lett. 81,4549 (1998)

[60] F.S. Levin, D.A. Micha eds : Long-range Casimir forces, Plenum Press, New York (1993)

[61] V.M. Mostepanenko, N.N. Trunov : The Casimir effect and its applications, Clarendon Press, Oxford (1997)

[62] M. Krech : *The Casimir effect in critical systems*, World Scientific, Singapour (2000)

[63] J.G. Brankov, D.M. Danchev, N.S. Tonchev: *Theory of critical phenomena in finite-size systems*, World Scientific, Singapour (2000)

[64] P.R. Buenzli, Philippe A. Martin : *The Casimir force at high temperature*, Europhysics Letter 72(1) (2005), 42-48

[65] S. Reynaud and A. Lambrecht : Casimir forces, arXiv : 1410.2746v2 [quant-ph] 16 Dec 2016