

# Séminaire des élèves : Diagrammatica

## Mécanique quantique relativiste de particules libres

Daniel Suchet

20 janvier 2011

Après n'avoir étudié que la physique du *XIX<sup>eme</sup>* siècle jusqu'à la fin de la prépa, nous avons abordé en peu de temps beaucoup de notions fondamentales à la fois en mécanique quantique et en relativité. Ces deux domaines nous ont cependant été présentés comme distincts et cloisonnés : la mécanique quantique n'utilise que l'expression classique de l'énergie  $H = \frac{p^2}{2m}$  tandis que la relativité ne rend pas compte de la description de particules en tant que paquets d'onde.

La théorie des champs relativiste demande de réunir ces deux extrêmes, en proposant une description quantique relativistes des particules. Une telle unification est en particulier indispensable à la compréhension des diagrammes de Feynmann. Cette première présentation du séminaire est une occasion de rappeler des résultats fondamentaux de chacun des deux domaines pour en proposer une nouvelle formulation qui rendra compte de l'ensemble des impératifs. Elle vise également à introduire la notion de champ, indispensable pour décrire correctement un système à nombre variable de particules.

## 1 Des particules aux champs.

### 1.1 Description d'une particule libre

La description d'une particule unique libre permet de rappeler quelques uns des postulats fondamentaux de la mécanique quantique.

D'après le principe de quantification, on peut associer au système un espace de Hilbert, que l'on notera  $\mathcal{H}_1$ . La particule est alors décrite par un vecteur de cet espace, que l'on cherche à décomposer sur une base adaptée. Pour cela, on cherche le plus souvent les états propres d'opérateurs hermitiens, appelés *observables*, car la théorie mathématique prédit que ces vecteurs forment une base orthogonale de l'espace.

Dans le cas d'une particule libre classique, on considère le hamiltonien  $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$  et on trouve ainsi une base constituée d'ondes planes, états propres à la fois du hamiltonien et de l'opérateur impulsion. Ces ondes planes sont des états entièrement définis par leur impulsion  $\vec{p}$  et on notera  $|\vec{p}\rangle$  l'état tel que  $\vec{p}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$ . On montre alors que la fonction d'onde associée à l'état  $|\vec{p}\rangle$  est de la forme  $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \propto e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}}$ . Son évolution est décrite par l'équation de Schrödinger  $i\frac{d\psi}{dt} = -\frac{\Delta\psi}{2m}$  et implique  $|\psi_{\vec{p}}(t)\rangle = e^{-iE_{\vec{p}}t}|\vec{p}\rangle = e^{i\frac{p^2 t}{2m}}|\vec{p}\rangle$ .

Deux problèmes sont cependant rapidement soulevés par cette description.

- Tout d'abord, il faut remarquer que si les ondes planes sont bien orthogonales, elles ne constituent pas des états normalisables, car l'intégrale  $\int \psi_{\vec{p}}(\vec{r})\psi_{\vec{p}}^*(\vec{r})d^3r$  diverge. Pour pouvoir utiliser les ondes

planes dans les développements théoriques, on est amené à considérer que l'espace est périodique et contenu dans un volume<sup>1</sup>  $L \times L \times L = V$ . Ces conditions entraînent la quantification des impulsions

$\vec{p} = \frac{2\pi}{L} \begin{bmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{bmatrix}$  et la normalisation des fonctions d'ondes  $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}}$ . Un état  $|\psi_{\vec{p}}\rangle$  peut donc être décrit par la fonction d'onde

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\left(\frac{p^2}{2m}t - \vec{p} \cdot \vec{r}\right)}$$

- D'autre part, les expressions utilisées jusqu'ici sont classiques, alors que notre cadre d'étude impose de prendre en compte la mécanique relativiste. L'expression de l'énergie  $E(\vec{p}) = \frac{p^2}{2m}$  doit donc être remplacée par  $E(\vec{p})^2 = p^2 + m^2$  et l'équation de Schrödinger par l'équation de Klein Gordon  $\square\psi = m^2\psi$ . Cependant, on peut toujours considérer comme solutions des ondes planes  $|p^\mu\rangle$ , où  $p^\mu = \begin{bmatrix} E \\ \vec{p} \end{bmatrix}$  est le quadrivecteur impulsion énergie. Ces états peuvent être décrits par des fonctions d'onde de la forme

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \alpha e^{i(p_\mu x^\mu)}$$

avec la relation de dispersion  $p_0 = +\sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + m^2}$

La normalisation des fonctions pose ici un nouveau problème. En effet, c'est la *probabilité* qui doit être normalisée, ce qui demande de définir correctement cette probabilité à partir des fonctions d'onde.

Dans le cas classique, la probabilité de présence d'une particule dans un volume  $d^3x$  est donnée par  $|\psi(x)|^2 d^3x$ . Cette expression ne peut pas être maintenue en physique relativiste : du fait de la contraction des longueurs par la transformation de Lorentz, la grandeur  $\int_V |\psi(x)|^2 d^3x$  ne saurait être un invariant relativiste.

Pour adapter la conservation de la probabilité, on introduit le quadrivecteur *courant de probabilité*  $P_\mu = \begin{pmatrix} P_0 \\ \vec{P} \end{pmatrix}$ . La conservation de la probabilité ( $\frac{dP}{dt} = 0$ ) est alors généralisée par la relation  $\partial_\mu P_\mu = 0$ . On cherche donc une grandeur qui vérifie une telle relation et redonne le résultat non relativiste à basse vitesse. Ces contraintes conduisent l'expression suivante :

$$P_\mu = i([\partial_\mu \psi^*] \psi - \psi^* [\partial_\mu \psi])$$

La normalisation des fonctions d'onde doit alors permettre de vérifier

$$\begin{aligned} 1 &= \int_V P_0 d^3x = \int_V i([\partial_0 \psi^*] \psi - \psi^* [\partial_0 \psi]) d^3x \\ &= \int_V i\left([-ip_0 \alpha^* e^{-i(p_\mu x^\mu)}\right] \alpha e^{i(p_\mu x^\mu)} - \alpha^* e^{-i(p_\mu x^\mu)} [ip_0 \alpha e^{i(p_\mu x^\mu)}]) d^3x \\ &= \int_V 2|\alpha|^2 p_0 d^3x . \end{aligned}$$

---

<sup>1</sup>La quantité  $L$  introduite étant arbitraire, elle doit disparaître des expressions physiques lorsque  $L \rightarrow +\infty$ .

On en déduit la condition de normalisation

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2Vp_0}} e^{i(p_\mu x^\mu)}$$

## 1.2 Plusieurs particules libres.

### 1.2.1 Opérateurs création et annihilation

Nous avons développé tous les outils nécessaires pour décrire l'évolution d'une particule libre. Malheureusement, la plupart des situations physiques demandent non seulement de décrire un grand nombre de particules, mais surtout des systèmes dans lesquels le nombre de particules peut varier. Dans un processus de collision par exemple, deux particules initialement libres forment un état final constitués d'un grand nombre de particules libres également. On ne peut donc pas se restreindre à un espace de Hilbert  $\mathcal{H}_1$  décrivant 1 particule ou même  $\mathcal{H}_n$  décrivant  $n$  particules. On est alors amenés à considérer l'espace de Fock, somme direct des espaces à  $n \in \mathbb{N}$  particules (l'état  $n = 0$  correspondant au vide) :

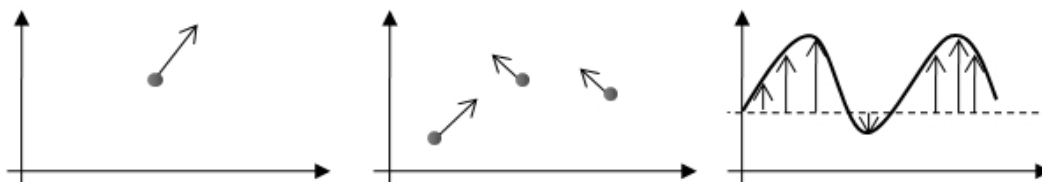
$$F(\mathcal{H}) = \bigoplus_{n=0}^{+\infty} \mathcal{H}_n$$

On introduit également les opérateurs créations  $a(\vec{p})^\dagger$  et annihilations  $a(\vec{p})$  qui agissent sur un état en ajoutant ou en enlevant une particule d'impulsion  $\vec{p}$  :

$$\begin{aligned} a(\vec{p}) : \mathcal{H}_n &\rightarrow \mathcal{H}_{n-1} & a(\vec{p})^\dagger : \mathcal{H}_n &\rightarrow \mathcal{H}_{n+1} \\ a(\vec{p})|\vec{q}\rangle &= 0 & a(\vec{p})^\dagger|\vec{q}\rangle &= |\vec{p}, \vec{q}\rangle \\ a(\vec{p})|\vec{p}, \vec{p}, \vec{q}, \vec{k}\rangle &= \sqrt{2}|\vec{p}, \vec{q}, \vec{k}\rangle & a(\vec{p})^\dagger|\vec{p}, \vec{p}, \vec{q}, \vec{k}\rangle &= \sqrt{3}|\vec{p}, \vec{p}, \vec{p}, \vec{q}, \vec{k}\rangle \end{aligned}$$

### 1.2.2 Notion de champs

Nous avons déjà rencontré le problème du traitement d'un très grand nombre de "particules" dans le cas de la corde vibrante. S'il est facile de décrire le mouvement d'un point matériel par sa position  $x$  et son impulsion  $p$ , on doit indexer chacun des points lorsqu'on en considère un nombre dénombrable et considérer une description sous forme de champ de déplacement lorsqu'on passe au continu.



Passage du discret au continu

De la même manière, pour décrire correctement un très grand nombre de particules dont chacune peut se trouver dans n'importe quel état d'impulsion  $\vec{p}$ , on introduit la notion de champ.

On note traditionnellement ce champ  $\phi$  et nous y consacrerons la suite de la présentation.

## 2 Du champs aux opérateurs : seconde quantification

### 2.1 Analogie avec l'électromagnétisme

Dans le cours d'optique quantique 2 : photons d'Alain Aspect, nous avons déjà eu à mener un raisonnement semblable. Rappelons en les étapes principales :

- Développer le champ série de Fourier pour faire apparaître les différents modes

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{l}} \epsilon_{\vec{l}}(t) e^{i\vec{k}_l \cdot \vec{r}} \vec{e}_{\vec{l}}$$

- Utiliser les équations de Maxwell pour faire apparaître des relations sur les coefficients des modes propres

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{l}} \mathcal{E}_{\vec{l}}^{(1)} \left( i\alpha_{\vec{l}}(t) e^{i\vec{k}_l \cdot \vec{r}} - i\alpha_{\vec{l}}^*(t) e^{-i\vec{k}_l \cdot \vec{r}} \right) \vec{e}_{\vec{l}}$$

- Exprimer le hamiltonien du système pour y faire apparaître des variables canoniques conjuguées

$$H = 2\epsilon_0 V \sum_{\vec{l}} \left( \mathcal{E}_{\vec{l}}^{(1)} \right)^2 |\alpha_{\vec{l}}|^2 = \sum_{\vec{l}} \frac{\omega_l}{2} (Q_l^2 + P_l^2)$$

- Passer à l'expression quantique en remplaçant les expressions par de opérateurs

$$\begin{array}{lll} H \rightsquigarrow \hat{H} & Q_{\vec{l}} \rightsquigarrow \hat{Q}_{\vec{l}} & \alpha_{\vec{l}} \rightsquigarrow \hat{a}_{\vec{l}} \\ & P_{\vec{l}} \rightsquigarrow \hat{P}_{\vec{l}} & \alpha_{\vec{l}}^* \rightsquigarrow \hat{a}_{\vec{l}}^\dagger \end{array}$$

On obtient ainsi un opérateur  $\hat{E} = \sum_{\vec{l}} \mathcal{E}_{\vec{l}}^{(1)} \left( i\hat{a}_{\vec{l}} e^{i\vec{k}_l \cdot \vec{r}} - i\hat{a}_{\vec{l}}^\dagger e^{-i\vec{k}_l \cdot \vec{r}} \right) \vec{e}_{\vec{l}}$  qui agit sur un espace décrivant le champ électromagnétique. Les opérateurs  $\hat{a}_{\vec{l}}^\dagger$  et  $\hat{a}_{\vec{l}}$  sont analogues à ceux considérés dans la section précédente : ils ajoutent ou enlèvent un quantum d'énergie  $\hbar\omega_{\vec{l}}$  dans le mode  $\vec{l}$  avec  $k_{\vec{l}} = \omega_{\vec{l}}$ , tout comme les opérateurs  $a(\vec{p})^\dagger$  et  $a(\vec{p})$  ajoutent une particule élémentaire d'énergie  $E$  dans l'état  $|\vec{p}\rangle$  avec  $E = \sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + m^2}$ .

Cet opérateur permet d'établir la valeur de toutes les expressions mesurables du système, aux fluctuations du vide près. Pour s'en convaincre, on peut considérer un champ électromagnétique monomode décrit par  $N$  photons dans le mode  $\vec{l}$  :

#### Point de vue opérateur

$$\text{Expression : } \hat{E} = \mathcal{E}_{\vec{l}}^{(1)} \left( i\hat{a}_{\vec{l}} e^{i\vec{k}_l \cdot \vec{r}} - i\hat{a}_{\vec{l}}^\dagger e^{-i\vec{k}_l \cdot \vec{r}} \right)$$

$$\text{Valeur moyenne : } \langle E \rangle = \langle N | \hat{E} | N \rangle = i\mathcal{E}_{\vec{l}}^{(1)} \left( \sqrt{N} \langle N | N - 1 \rangle e^{i\vec{k}_l \cdot \vec{r}} - \sqrt{N+1} \langle N | N + 1 \rangle e^{-i\vec{k}_l \cdot \vec{r}} \right) = 0$$

$$\text{Ecart type : } \langle E^2 \rangle = \langle N | \hat{E}^2 | N \rangle = \frac{1}{\epsilon_0 V} \left( N + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_{\vec{l}}$$

#### Point de vue champ

$$\text{Expression : } E = E_0 \cos \left( \omega_{\vec{l}} t - \vec{k}_{\vec{l}} \cdot \vec{r} \right), \text{ où } E_0 \text{ doit donner une énergie } H = V \frac{1}{2} \epsilon_0 E_0^2 = N \hbar\omega_{\vec{l}}$$

$$\text{Valeur moyenne : } \langle E \rangle = \frac{1}{T} \int_T E dt = 0$$

$$\text{Ecart type : } \langle E^2 \rangle = \frac{E_0^2}{2} = \frac{1}{\epsilon_0 V} \left( N + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_{\vec{l}}$$

## 2.2 Application aux champs

En appliquant la même méthode que pour les champs électromagnétiques, on obtient l'expression suivante :

$$\phi(x^\mu) = \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\sqrt{2V p_0}} (\alpha(\vec{p}) e^{ip_\mu x^\mu} + \alpha^*(\vec{p}) e^{-ip_\mu x^\mu})$$

On introduit alors l'opérateur champ, qui agit sur l'espace de Fock :

$$\hat{\phi}(x^\mu) = \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\sqrt{2V p_0}} (\hat{a}(\vec{p}) e^{ip_\mu x^\mu} + \hat{a}^\dagger(\vec{p}) e^{-ip_\mu x^\mu})$$

On décompose cet opérateur en deux parties, en regroupant les opérateurs création et annihilation :

$$\hat{\phi}(x^\mu) = \hat{A}(x^\mu) + \hat{A}^\dagger(x^\mu) \text{ avec } \hat{A}(x^\mu) = \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\sqrt{2V p_0}} (\hat{a}(\vec{p}) e^{ip_\mu x^\mu})$$

Les opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{A}^\dagger$  sont les développements en série de Fourier des opérateurs  $\hat{a}$  et  $\hat{a}^\dagger$ .

Comme dans le cadre de l'électromagnétisme, l'opérateur champ  $\hat{\phi}$  associé aux particules permet d'obtenir toutes les informations nécessaires sur un état donné du système dans l'espace de Fock.

## 3 Causalité

L'une des propriétés fondamentales de ce champ est d'être local : son expression dépend du point de l'espace-temps considéré. On peut par conséquent se demander si ces opérateurs respectent bien la causalité : si on considère l'action de  $\hat{\phi}$  en un point  $(x^\mu)$ , cette action modifie-t-elle l'action de  $\hat{\phi}$  en un point  $(y^\mu)$  ? Autrement dit, il y a-t-il une différence entre appliquer d'abord  $\hat{\phi}(x^\mu)$  puis  $\hat{\phi}(y^\mu)$  et l'opération inverse ? En terme plus mathématiques, cette question revient à considérer le commutateur  $[\hat{\phi}(x^\mu), \hat{\phi}(y^\mu)] = \hat{\phi}(x^\mu) \hat{\phi}(y^\mu) - \hat{\phi}(y^\mu) \hat{\phi}(x^\mu)$ . On se propose alors de montrer le résultat suivant :

$$\text{Si les deux points sont en dehors du cône de lumière l'un de l'autre, alors } [\hat{\phi}(x^\mu), \hat{\phi}(y^\mu)] = 0$$

### Démonstration

En rappelant les relations de commutations  $[\hat{a}(\vec{p}), \hat{a}(\vec{p})] = [\hat{a}^\dagger(\vec{p}), \hat{a}^\dagger(\vec{q})] = 0$  et  $[\hat{a}(\vec{p}), \hat{a}^\dagger(\vec{q})] = \delta_{\vec{p}, \vec{q}}$ , on montre que

$$[\hat{A}(x^\mu), \hat{A}(y^\mu)] = 0 \qquad [\hat{A}^\dagger(x^\mu), \hat{A}^\dagger(y^\mu)] = 0$$

$$[\hat{A}(x^\mu), \hat{A}^\dagger(y^\mu)] = \sum_{\vec{p}} \frac{1}{2V p_0} e^{ip_\mu(x^\mu - y^\mu)}$$

On en déduit l'expression suivante

$$\Delta(x - y) \equiv \left[ \hat{\phi}(x^\mu), \hat{\phi}(y^\mu) \right] = \sum_{\vec{p}} \frac{1}{2V p_0} \left( e^{ip_\mu(x^\mu - y^\mu)} - e^{-ip_\mu(x^\mu - y^\mu)} \right)$$

On considère alors le passage en continue en remplaçant la somme par une intégrale pondérée par la densité d'état

$$\Delta(x - y) = \int_{\vec{p}} \frac{1}{2p_0} \left( e^{ip_\mu(x^\mu - y^\mu)} - e^{-ip_\mu(x^\mu - y^\mu)} \right) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3}$$

- Montrons que la valeur  $\Delta(z)$  est invariante de Lorentz.

L'intégrale qui définit  $\Delta(z)$  ne porte que sur les composantes spatiales de  $p^\mu$  et nécessite de rajouter la relation de dispersion  $p_0 = \sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + m^2}$ . Nous allons la rajouter directement dans la somme de la manière suivante :

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(p_0^2 - \vec{p} \cdot \vec{p} - m^2) \theta(p_0) dp_0 = \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} \delta\left(\left(p_0 + \sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + m^2}\right)\left(p_0 - \sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + m^2}\right)\right) \theta(p_0) dp_0 \\ & = \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \frac{1}{\left(p_0 - \sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + m^2}\right)} \delta\left(p_0 + \sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + m^2}\right) + \frac{1}{\left(p_0 + \sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + m^2}\right)} \delta\left(p_0 - \sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + m^2}\right) \right] \theta(p_0) dp_0 \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \frac{1}{\left(p_0 + \sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + m^2}\right)} \delta\left(p_0 - \sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + m^2}\right) \right] \theta(p_0) dp_0 \\ & = \frac{1}{2p_0} \end{aligned}$$

On peut donc réécrire l'expression de  $\Delta(z)$  sous la forme :

$$\Delta(z) = \int_{p^\mu} \left( e^{ip_\mu z^\mu} - e^{-ip_\mu z^\mu} \right) \delta(p_\mu p^\mu - m^2) \theta(p_0) \frac{d_4 p}{(2\pi)^3}$$

Considérons une transformation de Lorentz  $\Lambda$  qui change  $z^\mu \rightsquigarrow z'^\mu = \Lambda^\mu_\nu z^\nu$  et  $p^\mu \rightsquigarrow p'^\mu = \Lambda^\mu_\nu p^\nu$ . Ces changements ne modifient ni la valeur de produit scalaire  $p_\mu z^\mu$ , ni la norme  $p_\mu p^\mu$ . L'élément différentiel  $d_4 p$  peut être relié à  $d_4 p'$  par le jacobien :  $d_4 p = |\det \Lambda| d_4 p' = d_4 p'$ . Enfin, comme les transformations de Lorentz ne permettent pas de passer du cône de lumière supérieur au cône de lumière inférieur et que le vecteur  $p^\mu$  est bien à l'intérieur du cône supérieur car sur la couche de masse, on doit avoir  $\theta(p_0) = \theta(q_0)$ . On en déduit que  $\Delta(z) = \Delta(\Lambda z)$

- Montrons que si  $z$  est de genre temps, alors on peut transformer  $z$  en  $z'$  avec  $z'_0 = 0$  par transformation de Lorentz.

On raisonne dans une transformation de Lorentz spéciale :  $z'_0 = \gamma(z_0 - \beta z_1)$  donc  $z'_0 = 0 \Leftrightarrow z_0 = \beta z_1 \Leftrightarrow \beta = \frac{z_0}{z_1}$  et dans le cas d'un vecteur de genre temps,  $z_\mu z^\mu \leq 0$  d'où  $z_0^2 - z_1^2 \leq 0$  et  $\frac{z_0}{z_1} \leq 1$  donc  $\beta \leq 1$ , ce qui est acceptable.

- Montrons que  $z_0 = 0 \Rightarrow \Delta(z) = 0$ .

$$\begin{aligned} \Delta(z)_{z_0=0} &= \int_{p^\mu} \left( e^{i\vec{p} \cdot \vec{z}} - e^{-i\vec{p} \cdot \vec{z}} \right) \delta(p_\mu p^\mu - m^2) \theta(p_0) \frac{d_4 p}{(2\pi)^3} \\ &= \int_{\vec{p}} \frac{1}{2p_0} \left( e^{i\vec{p} \cdot \vec{z}} - e^{-i\vec{p} \cdot \vec{z}} \right) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \end{aligned}$$

Or l'intégrale d'une fonction impaire sur l'espace des phases est nulle, d'où  $\Delta(z) = 0$ .