

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche
Scientifique

Université Dr Moulay Tahar de Saïda
Faculté des Sciences
Département de physique



Mémoire de fin d'étude pour l'obtention du Diplôme de
Master

Filière : Science de la matière

Spécialité : Physique

Option : Physique Numérique

Thème

Résolution numérique de l'équation de Klein-Gordon
via un potentiel harmonique

Présenté par l'étudiant :

- Benbrahim Khaled Ibn El Walid

Devant le jury :

| | |
|--------------------|------------|
| Mr Meskine Mohamed | Président |
| Mr Kouidri Smail | Rapporteur |
| Mr Doumi bendouma | Examineur |
| Mr Aek Boudali | Examineur |

Année :2015/2016

Dédicace

Je dédie ce modeste travail à :

A l'homme de ma vie, mon exemple éternel, mon soutien moral et source de joie et de bonheur, celui qui s'est toujours sacrifié pour me voir réussir, que dieu te garde dans son vaste paradis, à toi mon père.

A la lumière de mes jours, la source de mes efforts, la flamme de mon cœur, ma vie et mon bonheur ; maman que j'adore.

Aux personnes dont j'ai bien aimé la présence dans ce jour, à tous mes frères et mes sœurs, et mes amis Lahcen-Abdo-Nori-Karroum-Abdelhadi-Mohamed-Slimane-Nouh-Yyacine-habib et mes cousins Mustafa et Abdelkader je dédie ce travail dont le grand plaisir leurs revient en premier lieu pour leurs conseils, aides, et encouragements.

Aux personnes qui m'ont toujours aidé et encouragé, qui étaient toujours à mes côtés, et qui m'ont accompagnaient durant mon Chemin d'études supérieures, mes aimables amis, collègues d'étude

Remerciement

Je remercie dieu le tout puissant de nous avoir donné la santé et la volonté d'entamer et de terminer ce mémoire.

Tout d'abord, ce travail ne serait pas aussi riche et n'aurait pas pu avoir le jour sans l'aide et l'encadrement de Dr. Smail Kouidri. Je le remercie pour la qualité de son encadrement exceptionnel, pour sa patience, sa rigueur et sa disponibilité durant notre préparation de ce mémoire.

Je remercie infiniment le président de jury ainsi que ces membres d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Mes remerciement s'adressent également à tous mes professeurs pour leurs générosités et la grande patience dont ils ont su faire preuve malgré leurs charges académiques et professionnelles.

Je remercie profondément toutes les personnes qui m'ont aidé et soutenue de près ou de loin.

SOMMAIRE

| | |
|---|----|
| Introduction générale | 1 |
| Chapitre I..... | 3 |
| Théorie classique des champs | 3 |
| I.1.Introduction..... | 4 |
| I.1.1 Aspects historiques | 4 |
| I.1.2 L'apport de Maxwell | 5 |
| I.1.3 Invariance de jauge | 7 |
| I.2. Théorie de la relativité | 9 |
| I.2.1 l'espace de Minkowski | 9 |
| I.2.2 Géométrisation de la physique relativiste | 10 |
| I.2.3 Quadrivecteur | 13 |
| I.2.4 Métrique de Minkowski | 14 |
| I.3. Les formalismes lagrangien et hamiltonien | 14 |
| I.3.1 Mécanique analytique | 14 |
| I.4 Le passage des points matériels aux champs classiques:..... | 16 |
| I.5 Formalisme hamiltonien | 18 |
| I.6 Les équations de Maxwell | 20 |
| I.7 Le champ scalaire classique | 21 |
| Références I : | 23 |
| Chapitre II..... | 24 |
| Théorie quantique des champs | 24 |
| II.1 introduction | 25 |
| II.2 Le lagrangien d'un champ scalaire libre | 25 |
| II.3 Calcul de l'hamiltonien..... | 29 |
| II.4 Quantification canonique | 31 |
| II.5 L'hamiltonien | 32 |
| Référence II : | 37 |
| Chapitre III : | 39 |
| Résultat et discussions | 39 |

| | |
|---|-----------|
| III.1 introduction | 40 |
| III.2 Méthode des différences finies | 40 |
| III.3 Organigramme de calcul :..... | 42 |
| III.5 Calcul numérique : | 45 |
| III.6 Discussions des résultats | 47 |
| III.6.1 Le cas libre | 47 |
| III.6.1.1 Représentation de la fonction d'onde d'une particule libre | 47 |
| III.6.1.2 Représentation de la densité de particule libre | 48 |
| III.6.2 Cas liée :..... | 49 |
| III.6.2.1 Représentation de la fonction d'onde d'une particule liée | 49 |
| III.6.2.2 Présentation de la densité d'une particule liée | 50 |
| III.6.3 Comparaison des fonctions d'onde relativement au deux cas | 51 |
| III.6.4 Comparaison avec d'autre travaux | 52 |
| III.7 La résolution analytique | 53 |
| Référence III: | 57 |
| Conclusion | 58 |

Introduction générale

. La physique numérique a connu un essor considérable grâce aux modélisations numérique. Son développement tant dans le domaine théorique a permis aux théoriciens de trouver des modèles fiables nécessaire à l'explication de plusieurs phénomènes physiques observés récemment dans les expériences .

Ce mémoire présente des méthodes de résolution numériques de la fameuse équation dite Equation de Klein Gordon.

Cette équation qui est parfois également appelée équation de Klein-Gordon-Fock, est une version relativiste de l'équation de Schrödinger décrivant des particules massives de spin nul, sans ou avec charge électrique, établie indépendamment en 1926 par les physiciens Oskar Klein et Walter Gordon.

Elle peut être obtenue de la même manière que l'équation de Schrödinger mais en partant cette fois-ci de la relation énergie-impulsion relativiste.

Ce travail est divisé en trois parties:

- La première partie s'attache à présenter les fondements classique de la théorie des champs. Le chapitre I propose un exposé des contextes classiques basé sur l'étude de la fonction Lagrangienne où en se reposant sur les équations de l'électrodynamique classique données par Maxwell où on peut en déduire l'expression des quantités physiques telles que la fonction Hamiltonienne, les impulsions conjuguées etc. ...

Nous insisterons plus particulièrement sur les méthodes purement classique inspirés par des lois relativistes données par Albert d'Einstein.

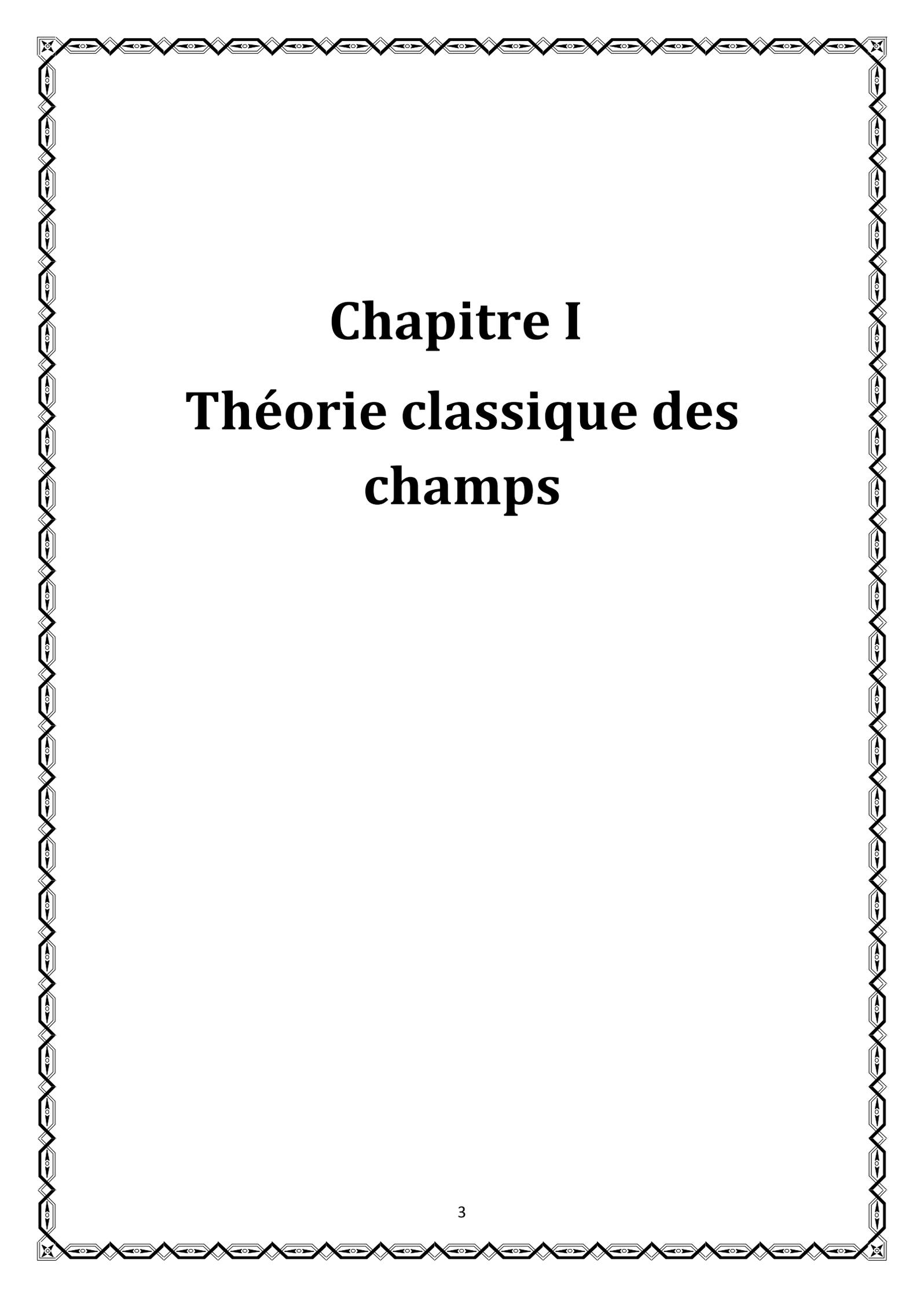
- La seconde partie est dédiée aux fondements quantiques de la théorie des champs. Le chapitre II concerne la mise en place des méthodes quantiques dans l'ordre de quantifier le Hamiltonien du système

• La dernière partie est consacrée à l'exposition de nos résultats numériques toute en se basant sur des programme informatique capables de nous donner des solutions acceptables de notre fameuse équation dite Equation de Klein Gordon. Nous discutons tout d'abord le cas où le champ est libre puis nous étendons notre calculs à des champs liés par des potentiel de type harmonique et de type de la référence [1,2].

Enfin une conclusion nous donnera les résultats obtenus et proposera des futurs travaux.

[1] T. Barakat, Phys. Lett. A **344** 411-417 (2005).

[2] T. Barakat, Journal Mod. Phys. A **22** 203-212 (2007).



Chapitre I

Théorie classique des champs

Chapitre I

I.1.Introduction

Dans ce chapitre nous allons nous intéresser à présenter toutes les notions classiques basées sur la bonne description du lagrangien d'un système.

Dans un premier temps, nous rappelons la théorie classique de Maxwell, les équations de Maxwell, aussi appelées équations de Maxwell-Lorentz, sont des lois fondamentales de la physique. Elles constituent les postulats de base de l'électromagnétisme, avec l'expression de la force électromagnétique de Lorentz. Elles traduisent sous forme locale différents théorèmes (Gauss, Ampère, Faraday) qui régissaient l'électromagnétisme avant que Maxwell ne les réunisse sous forme d'équations intégrales. Elles donnent ainsi un cadre mathématique précis au concept fondamental de champ introduit en physique par Faraday dans les années 1830. Ces équations montrent notamment qu'en régime stationnaire, les champs électrique et magnétique sont indépendants l'un de l'autre, alors qu'ils ne le sont pas en régime variable. Dans le cas le plus général, il faut donc parler du champ électromagnétique, la dichotomie électrique/magnétique étant une vue de l'esprit. Cet aspect trouve sa formulation définitive dans le formalisme covariant présenté dans la seconde partie de cet article : le champ électromagnétique y est représenté par un objet mathématique unique : le tenseur électromagnétique, dont certaines composantes s'identifient à celles du champ électrique et d'autres à celles du champ magnétique [1-7].

I.1.1. Aspects historiques

La synthèse de Maxwell a permis ultérieurement les deux plus grandes avancées de la physique moderne :

Chapitre I

- La théorie de la relativité restreinte (via le problème du référentiel de l'hypothétique éther). En effet, les équations de Maxwell permettent de prédire l'existence d'une onde électromagnétique, c'est-à-dire que la modification d'un des paramètres (densité de charge, intensité du courant) a des répercussions à distance avec un certain retard. Or, la vitesse de ces ondes, c , calculée avec les équations de Maxwell, est égale à la vitesse de la lumière mesurée expérimentalement. Cela a permis de conclure que la lumière était une onde électromagnétique.

Le fait que c soit la même dans toutes les directions et indépendante du référentiel, conclusion que l'on tire de ces équations, est un des fondements de la théorie de la relativité restreinte. Si l'on change de référentiel, le changement de coordonnées classique ne s'applique pas aux équations de Maxwell, il faut utiliser une autre transformation : la transformation de Lorentz. Einstein a tenté d'appliquer les transformations de Lorentz à la mécanique classique, ce qui l'a conduit à la théorie de la relativité restreinte.

- La physique quantique : L'étude de la lumière et des ondes électromagnétiques, avec notamment les travaux de Max Planck sur le corps noir et d'Heinrich Hertz sur l'effet photoélectrique, donna naissance à la théorie quantique en 1900.

I.1.2. L'apport de Maxwell

Vers 1865, Maxwell a réalisé une synthèse harmonieuse des diverses lois expérimentales découvertes par ses prédécesseurs (lois de l'électrostatique, du magnétisme, de l'induction...). Mais cette synthèse n'a été possible que parce que Maxwell a su dépasser les travaux de ses devanciers, en introduisant dans une équation un « chaînon manquant », appelé le courant de déplacement, dont la présence assure la cohérence de l'édifice unifié.

Chapitre I

Maxwell a d'abord publié en 1865 sa théorie sous la forme de 20 équations à 20 inconnues, écrit à l'aide de quaternions. En 1873, dans l'ouvrage en deux volumes *A Treatise on Electricity and Magnetism*, Maxwell a déjà réécrit sa théorie sous la forme de 8 équations. Ce n'est que plus tard qu'Heaviside réécrivit ces équations sous la forme des 4 équations vectorielles aux dérivées partielles :

Dont le premier est local, elle donne la divergence du champ électrique en fonction de la densité de la charge électrique

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (I - 1)$$

Et dont la deuxième qui traduit la divergence du champ magnétique \vec{B} :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (I - 2)$$

Car il n'existe pas de monopôle magnétique. Un monopôle magnétique, D'ailleurs, serait une source ponctuelle de champ magnétique, analogue de la charge électrique ponctuelle pour le champ électrique. Où l'objet de base, source, d'un champ magnétique est l'aimant, qui se comporte comme un dipôle magnétique : un aimant possède en effet un pôle nord et un pôle sud.

La troisième équation elle donne le rotationnel du champ électrique en fonction de la dérivée temporelle du champ magnétique

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (I - 3)$$

Et finalement le quatrième résultat théorème d'Ampère. Sous forme locale, elle s'écrit en termes du vecteur densité de courant \vec{j} :

$$C^2 \vec{\nabla} \times \vec{B} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (I - 4)$$

Chapitre I

$$\text{Ou : } c^2 = \frac{1}{\mu_0 \epsilon_0}$$

I.1.3 Invariance de jauge

L'analyse vectorielle montre que la divergence d'un rotationnel est toujours identiquement nulle :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \times A = 0 \quad (I - 5)$$

L'équation locale de conservation du flux magnétique permet donc de définir au moins localement un potentiel-vecteur \vec{A} tel que :

$$\vec{\nabla} \times A = \vec{B} \quad (I - 6)$$

L'analyse vectorielle nous dit également que

$$\overrightarrow{\text{rot grad}} = \vec{0} \quad (I - 7)$$

Alors le potentiel-vecteur n'est pas défini de manière unique puisque la transformation suivante, avec f une fonction quelconque

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} f \quad (I - 8)$$

ne modifie pas la valeur du champ \vec{B} . Ceci est un exemple de transformation de jauge. Il faut donc imposer des conditions supplémentaires pour définir \vec{A} de façon non-ambiguë. On appelle cela des conditions de jauge, par exemple la jauge de Coulomb ou encore la jauge de Lorenz.

En physique classique, le potentiel-vecteur semble n'être qu'un outil mathématique commode pour analyser les solutions des équations de Maxwell, mais ne semble pas être une grandeur physique directement mesurable. En 1959, dans le cadre de la physique quantique, Aharonov et

Chapitre I

Bohm ont démontré que le potentiel-vecteur avait un effet observable en mécanique quantique : c'est l'effet Aharonov-Bohm.

L'équation de Maxwell-Faraday couplée à l'existence locale d'un potentiel-vecteur \vec{A} permettent de définir (au moins localement) le potentiel électrique V (scalaire) tel que :

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}V - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (I - 9)$$

Le potentiel V lui non plus n'est pas défini de façon unique mais la transformation de jauge associée et liée à celle de \vec{A} est la suivante (on rappelle celle de \vec{A} par souci de clarté) et on a :

$$\begin{cases} V \rightarrow V - \frac{\partial f}{\partial t} \\ \vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}f \end{cases} \quad (I - 10)$$

Ces deux équations donnent l'invariance de jauge complète des équations de Maxwell.

I.2. Théorie de la relativité

I.2.1 l'espace de Minkowski

Du nom de son inventeur Hermann Minkowski, est un espace mathématique, et plus précisément un espace affine pseudo-euclidien à quatre dimensions, modélisant l'espace-temps de la relativité restreinte : les propriétés géométriques de cet espace correspondent à des propriétés physiques présentes dans cette théorie, la réciproque n'étant pas vraie car le réalisme physique n'est pas entièrement décrit par cette géométrisation, avant la physique classique est également géométrisée, et ce depuis Isaac Newton, voire avant ; l'intérêt de cette géométrisation de la relativité restreinte est dans le fait que le temps lui-même y est représenté comme indissociablement lié à l'espace matériel, que les propriétés abstraites de la relativité restreinte y trouvent une représentation proche de la géométrie euclidienne, et que cela a aidé à la formulation de la relativité générale.

Cet espace a été introduit dès 1905 par Henri Poincaré, soit deux ans avant les publications de Hermann Minkowski sur ce sujet. La primeur de la découverte est un sujet à débats, mais il semble, d'après certains historiens des sciences, que l'interprétation moderne de cet espace comme espace-temps physique, et non pas convention calculatoire, est une idée de Minkowski, qui abandonna l'éther électromagnétique, à la suite d'Einstein, alors que Poincaré n'y renonça jamais vraiment, considérant que dans un référentiel quelconque les quantités mesurées sont toujours « apparentes », alors que les quantités « réelles » sont mesurées dans le référentiel de l'éther Poincaré aurait proposé cet espace comme une présentation algébrique et géométrique possible, pratique d'un point de vue calculatoire, mais axiomatique, c'est-à-dire conventionnelle, des propriétés mathématiques liées au principe de relativité et à l'invariance des équations de Maxwell par changement de référentiel inertiel, en privilégiant de

Chapitre I

manière conventionnelle comme réel le référentiel de l'éther, c'est-à-dire un espace réel qui serait classique.

Seul Hermann Minkowski aurait vu dès 1907 que cet espace était un modèle expérimentable (et pas seulement conventionnel) d'un espace-temps où espace et temps sont liés dans les lois de la mécanique et y développa, entre autres, les conditions de la causalité et de la simultanéité suivant le référentiel de l'observateur. Poincaré se rapprochera de ce point de vue en 1912, dans sa dernière conférence intitulée L'espace et le temps prononcée à Londres, où il exprimera que l'on peut définir un espace-temps à partir du groupe de symétrie des lois de la physique, en posant cette fois le principe de relativité comme une convention

1.2.2 Géométrisation de la physique relativiste

Les points géométriques représentent les événements physiques et sont repérés par quatre coordonnées (ct, x, y, z) : la coordonnée de temps et les trois coordonnées d'espace. Les repères mathématiques y représentent les référentiels galiléens, et l'obligation en mathématiques de choisir un repère, pour désigner les points par des coordonnées, correspond à celle, en physique, de choisir un référentiel pour l'observateur, y compris pour le choix de la mesure du temps

Du point de vue du réalisme intuitif, la particularité mathématique de cet espace affine tient à sa distance entre deux points, appelée pseudo-métrique, qui a été construite par Hermann Minkowski pour être invariante par les changements de repère que sont les transformations de Lorentz. La pseudo-métrique est aussi appelée pseudo-norme quand on n'utilise que l'espace vectoriel sous-jacent à l'espace affine. Cette pseudo-métrique correspond au temps propre entre deux événements qui peuvent être causalement joints, ou correspond à la distance propre entre eux s'ils ne le peuvent pas.

Chapitre I

Si on imagine qu'un faisceau lumineux soit émis à l'instant t et se propage sur l'axe à la vitesse constante de la lumière, c :

$C=x/t$, qu'on peut aussi écrire sous la forme : $x=ct$

Dans l'espace-temps de Minkowski, cette équation s'écrit :

$$ct = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (I - 11)$$

On portant tout le carré pour supprimer de la racine on obtient :

$$(ct)^2 = x^2 + y^2 + z^2$$
$$(ct)^2 - x^2 - y^2 - z^2 = 0 \quad (I - 12)$$

Implicitement, des 1907 le temps joue un rôle sur la géométrie de l'espace, puisqu'il ajoute un supplémentaire à notre équation, c^2t^2 une mesure de l'espace-temps.

Considérons deux des événements de coordonnées $(x_1y_1z_1)$ et $(x_2y_2z_3)$ et remplaçons les variables dans l'équation (I - 12) :

$$(\Delta s)^2 = c^2(t_2 - t_1)^2 - [(x_2 - x_1)^2 - (y_2 - y_1)^2 - (z_2 - z_1)^2] \quad (I - 12a)$$

Et on posant que :

$$\Delta t = t_2 - t_1 \quad (I - 12b)$$

$$\Delta x = x_2 - x_1 \quad (I - 12c)$$

$$\Delta y = y_2 - y_1 \quad (I - 12d)$$

$$\Delta z = z_2 - z_1 \quad (I - 12e)$$

Donc la pseudo-métrique, notée Δs et définie par :

Chapitre I

$$\Delta s^2 = -c^2(\Delta t)^2 + (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2 \quad (I - 13)$$

Ou bien :

$$\Delta s^2 = c^2(\Delta t)^2 - (\Delta x)^2 - (\Delta y)^2 - (\Delta z)^2 \quad (I - 14)$$

suivant la convention de signes (-, +, +, +) ou (-, +, +, +) choisie

Cette définition rend la pseudo-métrique identique à l'intervalle d'espace-temps qui est l'invariant relativiste par changement de référentiel galiléen. Un événement étant donné, l'ensemble des événements physiquement joignables dans le futur et de ceux du passé à partir desquels on pouvait joindre l'événement donné, forme un cône dans l'espace de Minkowski, appelé cône de lumière, et permettant des raisonnements purement géométriques par des dessins appelés diagrammes de Minkowski.

Cet espace est pseudo-euclidien : bien que la métrique ne soit qu'une pseudo-métrique, les géodésiques y sont les droites, ce qui fait dire que cet espace est plat comme dans un espace euclidien. Les inégalités triangulaires qui y sont valables montrent qu'un segment est le chemin le plus long entre deux points, ce qui est une nette différence avec la géométrie euclidienne.

Dans cet espace, la dimension relative au temps peut être considérée comme un nombre imaginaire, alors que les trois autres coordonnées (spatiales) sont toujours des nombres réels : ce choix modifie l'écriture de la pseudo-norme et la présentation des calculs, sans apporter plus de simplicité.

Un référentiel de l'espace (affine) de Minkowski est un référentiel galiléen pour un observateur : choix d'un lieu et moment de référence, choix d'axes tridimensionnels et d'un temps. Un observateur, et son référentiel, étant plongé dans cet espace, il repère un événement (point de l'espace-temps)

Chapitre I

par ses coordonnées temporelle (t) et spatiales (x, y, z) : un point M est noté par $M(ct; x; y; z)$ ou bien $M(x^0, x^1, x^2, x^3)$ est-ce sont des quadrivecteur.

I.2.3 Quadrivecteur

Dans La théorie de la relativité (restreinte, puis générale) élaborée par Einstein amène à considérer les trois coordonnées d'espace (par exemple hauteur, largeur, profondeur) et le temps comme formant un tout indissociable. Dans le cas de la relativité restreinte, l'espace plat est l'espace-temps de Minkowski à quatre dimensions

En relativité restreinte, un quadrivecteur est alors un vecteur de l'espace-temps de Minkowski de dimension quatre, avec quatre coordonnées : cela signifie qu'en cas de changement de référentiel, les changements des coordonnées se font par les transformations de Lorentz (c'est ce que l'on nomme la covariance des coordonnées), ce qui est équivalent à l'invariance de la pseudo-norme par changement de référentiel. Exprimer dans une base vectorielle donnée de l'espace-temps de Minkowski, on parle de quadrivecteurs contravariants.

À partir de cette base et du produit scalaire de l'espace de Minkowski, on construit une autre base vectorielle, dite covariante, permettant d'écrire le produit scalaire de manière allégée. Exprimés dans cette seconde base, les quadrivecteurs sont dits covariants, En relativité générale, un quadrivecteur est un quadrivecteur de l'espace tangent de la variété de dimension quatre de ce théorie caractérisé par l'espace du temps et trois composants de l'espace euclidien x, y, z et notée :

$$\begin{cases} x^0 = ct \\ x^1 = x \\ x^2 = y \\ x^3 = z \end{cases} \quad (I - 15)$$

I.2.4 Métrique de Minkowski

En notant μ et ν des indices d'espace-temps à 4 dimensions la métrique de Minkowski s'écrit, avec la signature $(-,+,+,+)$

$$\eta_{\mu\nu} \equiv \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (I - 16)$$

ou bien sous forme différentielle :

$$ds^2 = \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = -c^2 dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (I - 17)$$

Une autre possibilité est de choisir la signature $(+,-,-,-)$:

$$\eta_{\mu\nu} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (I - 18)$$

la forme différentielle est alors :

$$ds^2 = \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 \quad (I - 19)$$

I.3. Les formalismes lagrangien et hamiltonien

Alors que la mécanique quantique traditionnelle se base principalement sur le formalisme hamiltonien, c'est le Lagrangien qui joue un rôle central en théorie quantique des champs. Avant de développer la théorie classique des champs, nous rappelons sans démonstration les principaux résultats de mécanique analytique.

I.3.1 Mécanique analytique

Pour décrire un système physique à N degrés de liberté, on choisit un ensemble de N coordonnées généralisées $\{q_i\}_{i=1}^N$. Il existe alors une fonction de ces N variables, de leurs dérivées temporelle et éventuellement du temps, qui se caractérise entièrement le système : le lagrangien

Chapitre I

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\{q_i\}, \{\dot{q}_i\}, t) \quad (I - 20)$$

On définit alors l'action par :

$$S[\{q_i\}] := \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i, t) \quad (I - 21)$$

Toute l'information concernant le système est entièrement contenue dans cette fonction fondamentale.

On peut finalement énoncer le principe variationnel qui régit la dynamique. Etant données les conditions de bords $q_i(t_1) = q_i^{(in)}$ et $q_i(t_2) = q_i^{(out)}$, le principe de moindre action postule que le système évolue de telle sorte que l'action le long de la trajectoire physique soit extrême (en général minimale), i.e :

$$\delta S = 0 \quad (I - 22)$$

Sur un trajectoire physique.

On en déduit aisément les N équations du mouvement, ou équations d'Euler-Lagrange :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}, \quad i = 1, \dots, N \quad (I - 23)$$

Une formulation équivalente du problème a été proposée par Hamilton. A partir du Lagrangien, on définit les N impulsions généralisées $\{p_i\}$, conjuguées aux coordonnées $\{q_i\}$ par :

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \quad i = 1 \dots \dots N \quad (I - 24)$$

L'Hamiltonien est alors défini comme la transformée de Legendre du Lagrangien :

Chapitre I

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\{q_i\}, \{p_i\}, t) = p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} \quad (I - 25)$$

Ou les \dot{q}_i sont implicitement considérés comme des fonctions des q_i et des p_i , au travers de l'éq (I - 24) Notons que dans cette formule et dans toute la suite de ce cours, on utilisera la convention de sommation d'Einstein. Du principe de moindre action et des définitions ci-dessus, on obtient un ensemble de $2N$ équations du premier ordre, équivalentes à l'équation (I - 23), les équations de Hamilton

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}, \quad (I - 26)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \quad (I - 27)$$

Finalement, on peut écrire ces équations sous une forme qui met en lumière la structure algébrique de la physique :

$$\dot{q}_i = \{\mathcal{H}, q_i\} \quad (I - 28)$$

$$\dot{p}_i = \{\mathcal{H}, p_i\} \quad (I - 29)$$

Ou $\{A, B\} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} - \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \right]$ est le crochet de poisson des deux fonctions A et B

I.4 Le passage des points matériels aux champs classiques:

Soit un système à N degrés de liberté on définit un champ lorsqu'à chaque point de l'espace \vec{x} , on associe un ou plusieurs nombres réels ou complexes. Le passage de q_i , $i=1 \dots N$ à $q_{\vec{x}}$, $x \in D$, ou $D \subset R^n$, revient à considérer un nombre infini non dénombrable de degrés de liberté d'où la nouvelle notation est :

$$\begin{cases} q_{\vec{x}} \equiv \phi(t, \vec{x}) \\ \dot{q}_{\vec{x}} \equiv \dot{\phi}(t, \vec{x}) \\ p_{\vec{x}} \equiv \pi(t, \vec{x}) \end{cases} \quad (I - 30)$$

On peut citer comme exemple, en électrodynamique classique, les champs :

$A^\mu(t, \vec{x})$: Le 4 – potentiel

$\vec{E}(t, \vec{x})$: Le champ électrique

$\vec{B}(t, \vec{x})$: Le champ d'induction

L'évolution d'un champ est complètement caractérisée par la densité lagrangienne $\mathcal{L} = (\phi(t, \vec{x}), \partial_\mu \phi(t, \vec{x}))$ qui produit le Lagrangien par une simple intégration :

$$\mathcal{L}[\phi, \partial_\mu \phi] := \int d^3x \mathcal{L}(\phi(t, \vec{x}), \partial_\mu \phi(t, \vec{x})) \quad (I - 31)$$

L'action correspondant à ce champ se note alors :

$$S[\phi, \partial_\mu \phi] = \int d^4x \mathcal{L}(\phi(t, \vec{x}), \partial_\mu \phi(t, \vec{x})) \quad (I - 32)$$

Ou $d^4x = dt \cdot d^3x$ est la mesure d'intégration sur le 4-volume d'espace-temps. Notons que le passage d'un indice discret à un indice continu a fait des grandeurs comme l'action et le Lagrangien (ce serait aussi le cas de l'Hamiltonien) non plus de simples fonctions des q_i mais des fonctionnelles réelles des champs ϕ et $\partial_\mu \phi$.

A partir d'ici, on notera simplement x , voire x^μ , $\mu = 0,1,2,3$, pour le couple (t, \vec{x}) , i.e . Pour les coordonnées contra variantes.

Calculons la variation de l'action liée à cette perturbation :

$$\delta S = S[\phi + \delta\phi, \partial_\mu(\phi + \delta\phi)] - S[\phi, \partial_\mu \phi] \quad (I - 32a)$$

$$= \int d^4x \{ \mathcal{L}[\phi + \delta\phi, \partial_\mu\phi + \partial_\mu\delta\phi] - \mathcal{L}[\phi, \partial_\mu\phi] \} \quad (I - 32b)$$

$$= \int d^3x \left\{ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} \delta\phi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial[\partial_\mu\phi]} \delta[\partial_\mu\phi] \right\} \quad (I - 32c)$$

$$= \int d^4x \left\{ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} \delta\phi - \partial_\mu \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial[\partial_\mu\phi]} \delta\phi \right] \right\} + \int_{t_1}^{t_2} d^3x \left\{ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial[\partial_0\phi]} \delta\phi \right\} \\ + \int dt. d\vec{\sigma}. \left\{ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\vec{\partial}\phi} \delta\phi \right\} \quad (I - 32d)$$

$$\int d^4x \left\{ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} - \partial_\mu \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial[\partial_\mu\phi]} \right] \delta\phi \right\} \equiv \int d^4x \left(\frac{\delta S}{\delta\phi} \right) \delta\phi \quad (I - 33)$$

Ou on a utilisé le fait que la dérivation et la variation commutent, et où la quatrième égalité provient d'une intégration par partie et d'une application du théorème de la divergence; le premier terme de surface disparaît puisqu'on a supposé que la variation satisfait toujours aux conditions de bord, et le second est nul puisque la variation est locale et que l'on peut prendre comme surface Σ une sphère dont on fait tendre le rayon vers l'infini. La variation $\delta\phi$ étant quelconque, on obtient l'équation d'Euler-Lagrange pour le champ ϕ :

$$\frac{\delta S}{\delta\phi} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} - \partial_\mu \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial[\partial_\mu\phi]} \right] = 0 \quad (I - 34)$$

C'est l'équation fondamentale du mouvement pour le champ ,

I.5 Formalisme hamiltonien

On définit le champ $\pi(x)$, l'impulsion conjuguée au champ $\phi(x)$ par la formule :

$$\pi(x) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}} \quad (I - 35)$$

Chapitre I

Ou $\dot{\phi} = \partial_0 \phi$ La densité l'hamiltonienne $\mathcal{H}(\phi(x), \partial_i \phi(x), \pi(x))$ est alors définie par

$$\mathcal{H} = \pi \dot{\phi} - \mathcal{L} \quad (I - 36)$$

et l'Hamiltonien du système est une fonctionnelle des champs $\phi, \partial_i \phi$ et π :

$$H[\phi, \partial_i \phi, \pi] = \int d^3x \mathcal{H}(\phi(x), \partial_i \phi(x), \pi(x)) \quad (I - 37)$$

On définit alors les crochets de Poisson pour des fonctionnelles $A[\phi, \pi]$ et $B[\phi, \pi]$ par :

$$\{A, B\} = \frac{\delta A}{\delta \pi} \frac{\delta B}{\delta \phi} - \frac{\delta A}{\delta \phi} \frac{\delta B}{\delta \pi} \quad (I - 38)$$

et on insiste sur le fait qu'il s'agit à nouveau de dérivées fonctionnelles. On a alors les relations canoniques suivantes :

$$\{\pi(x, \vec{t}), \phi(t, \vec{x}),\} = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \quad (I - 39)$$

Les équations du mouvement sont alors

$$\dot{\phi} = \{\mathcal{H}, \phi\} \quad (I - 40)$$

$$\dot{\pi} = \{\mathcal{H}, \pi\} \quad (I - 41)$$

Bien qu'avec les équations (I - 34) et (I - 40), nous ayons explicitement les équations du mouvement sous une forme extrêmement général, il s'avère en pratique qu'il est souvent plus aisé de revenir au principe de Hamilton original pour dériver les équations du mouvement, donc de faire varier l'action directement et d'imposer qu'au premier ordre, la variation s'annule.

Rappelons que nous avons introduit ici la notion de champ et dérivé les équations du mouvement, tant à partir du Lagrangien que de l'Hamiltonien.

Chapitre I

Mais il s'agit toujours d'une théorie classique, aucune quantification du champ n'étant intervenue à ce stade. Appliquons ces résultats à deux exemples importants : l'électrodynamique classique et le champ scalaire classique. Nous en profitons pour illustrer la remarque ci-dessus

I.6 Les équations de Maxwell

Rappelons quelques éléments d'électrodynamique dans le vide. La théorie repose entièrement sur le tenseur de Maxwell F^{uv} (antisymétrique et deux fois contravariant), défini à partir du 4-potentiel A^u :

$$F^{uv} = \partial^\mu A^v - \partial^v A^\mu \quad (I - 42)$$

Les deux premières équations de Maxwell sont alors automatiquement satisfaites :

$$\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \partial^\mu F^{\rho\sigma} = 0 \Leftrightarrow \text{div} \vec{B} = 0 \ \& \ \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \text{rot} \vec{B} = 0 \quad (I - 43)$$

Où $\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$: Tenseur Levi-Civita

Les deux dernières peuvent être réécrites de la manière suivante :

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 0 \Leftrightarrow \text{div} \vec{E} = 0 \ \& \ \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \text{rot} \vec{B} = 0 \quad (I - 44)$$

On montre maintenant que ce système d'équations peut être redérivé d'un Lagrangien et du principe de Hamilton. Soit le Lagrangien de l'électrodynamique

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (I - 45)$$

Dérivons les équations du mouvement :

$$\delta S = \int d^4x \left\{ -\frac{1}{4} [F_{\mu\nu} \delta F^{\mu\nu} + \delta F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}] \right\} \quad (I - 46b)$$

$$= \int d^4x \left\{ -\frac{1}{2} F_{\mu\nu} [\partial^\mu \delta A^\nu - \partial^\nu \delta A^\mu] \right\} \quad (I - 46b)$$

$$\int d^4x \{ -\partial^\nu F_{\mu\nu} \delta A^\mu \} = \int d^4x \{ \partial_\mu F^{\mu\nu} \} \delta A_\nu \quad (I - 47)$$

Où la dernière ligne est obtenue par une intégration par parties l'antisymétrie de $F^{\mu\nu}$. En imposant que cette quantité s'annule, on retrouve bien les équations (I - 44)

On a donc réussi à réduire le système relativement compliqué des équations de Maxwell pour les champs \vec{E} et \vec{B} à un simple et élégant principe. On voit une fois de plus ici la puissance du calcul variationnel en physique.

Dimensions : $[S] : GeV^0$, $[\mathcal{L}] : GeV^4$, $[A_\mu] : GeV^1$

I.7 Le champ scalaire classique

La description du champ scalaire est basée sur la lagrangien suivants :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{1}{2} m^2 \phi^2 - \frac{\lambda}{4} \phi^4 \quad (I - 48)$$

Alors :

$$\delta S = \int d^4x \{ \partial_\mu \phi \partial^\mu \delta \phi - m^2 \phi \delta \phi - \lambda \phi^3 \delta \phi \} \quad (I - 49a)$$

$$= \int d^4x \{ -\partial_\mu \partial^\mu - m^2 \phi - \lambda \phi^3 \} \delta \phi \quad (I - 49b)$$

D'où les équations du mouvement :

$$\partial_\mu \partial^\mu \phi + m^2 \phi + \lambda \phi^3 = 0 \quad (I - 50)$$

Dimensions : $[\mathcal{L}] : GeV^4$, $[\phi] : GeV^1$, $[m^2] : GeV^2$, $[\lambda] : GeV^0$

Chapitre I

On peut ici illustrer l'équivalence des formalismes lagrangien et hamiltonien. On a successivement :

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi'} = \partial_0 \phi \quad (I - 51)$$

$$\mathcal{H} = \pi^2 - \frac{1}{2} \pi^2 + \frac{1}{2} \partial_i \phi \partial_i \phi + \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + \frac{\lambda^4}{4} \quad (I - 52)$$

$$H = \int d^3 x \left\{ \frac{1}{2} \pi^2 + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + \frac{\lambda}{4} \phi^4 \right\} \quad (I - 53)$$

Ou $\nabla \phi \equiv \partial_i \phi$. Les équations de Hamilton sont alors :

$$\dot{\phi} = \{H, \phi\} = \int d^3 x \left\{ \frac{(\pi)^2(x)}{2}, \phi(y) \right\} = \int d^3 x \pi \delta(x - y) = \pi \quad (I - 53a)$$

$$\begin{aligned} \dot{\pi} = \{H, \pi\} &= \int d^3 x \left[\left\{ \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2, \pi \right\} + \left\{ \frac{1}{2} m^2 \phi^2, \pi \right\} + \left\{ \frac{\lambda}{4} \phi^4, \pi \right\} \right] \quad (I - 53b) \\ &= \nabla^2 \phi - m^2 \phi - \lambda \phi^3 \quad (I - 53c) \end{aligned}$$

Les deux exemples ci-dessus sont tout à fait représentatifs du genre de calculs qui apparaissent très souvent lorsqu'on dérive les équations du mouvement pour des champs quelconques (intégration par parties, montée et descente d'indices, ...). Il est donc important de bien comprendre les étapes effectuées,

Maintenant avec ce bagage classique on peut entamer notre théorie quantique qui est l'objectif du deuxième chapitre.

Chapitre I

Références I :

- [1] Soper D. E. (1976), Classical Field Theory (John Wiley & Sons, New York), 259 pages.

- [2] Goldstein H. (1980), Classical Mechanics, second edition (Addison-Wesley, Reading), 672 pages.

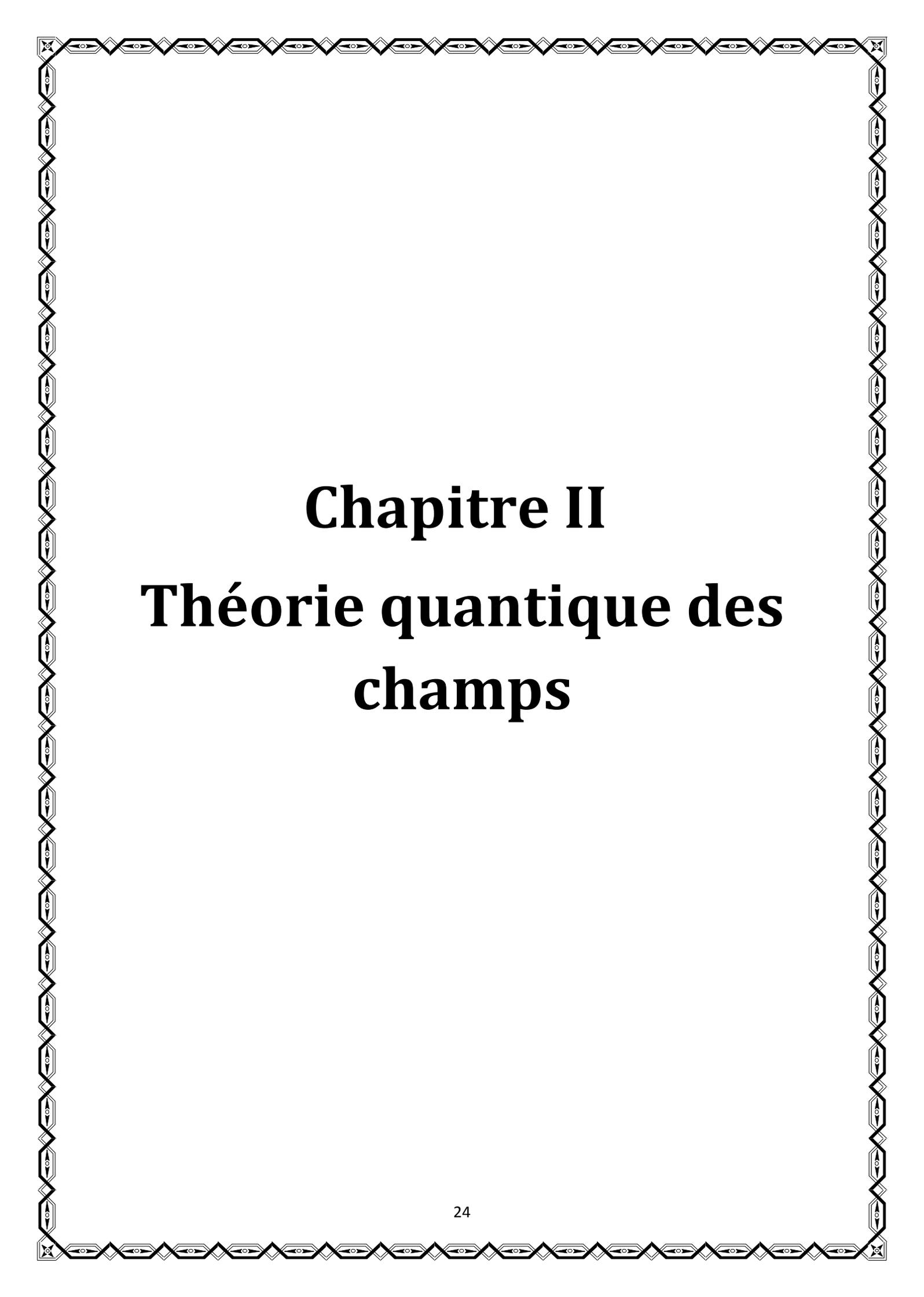
- [3] Hagedorn R. (1963), Relativistic Kinematics (Benjamin, New York), 166 pages.

- [4] Champs Quantiques Relativistes Notes du cours du Professeur Mikhaïl Shaposhnikovn Sven Bachmann 2007 .

- [5] J. D. Jackson, «Electrodynamique classique », (Paris : Dunod, 2001), traduction française de “Classical electrodynamics, 3rd edition” (New York: John Wiley & Sons, 1999) 132

- [6] L. Landau et E. Lifchitz « Théorie du champ », (Moscou : Mir, 1966) 132

- [7] Classical Mechanics, Goldstein, Poole and Safko, Addison-Wesley



Chapitre II

Théorie quantique des champs

Chapitre II

II.1 introduction

Dans ce chapitre nous allons vous exposer un petit peu de la théorie quantique des champs ou nous allons concentrer notre étude à quantifier notre Lagrangien décrit au chapitre I d'une manière classique toute en le réécrivant sous sa forme covariante [1-18].

II.2 Le lagrangien d'un champ scalaire libre

Le Lagrangien d'un champ scalaire réel s'écrit :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{m^2}{2} \phi^2 \quad (II - 1)$$

Ou $\phi(x)$ est un champ réel,

Et utilisant le principe d'action qui minimise l'action nous aboutissons aux équations du mouvement qui ne sont autres que les équations d'Euler Lagrange:

$$\frac{\delta S}{\delta \phi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\partial_\mu \phi]} \right] = 0 \quad (II - 2)$$

On applique ces dérivées sur l'équation du Lagrangien d'un champ scalaire

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = -m^2 \phi \quad (II - 2a)$$

$$-\partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial [\partial_\mu \phi]} \right] = -\partial_\mu [\partial^\mu \phi] \quad (II - 2b)$$

Alors :

$$-m^2 \phi - \partial_\mu [\partial^\mu \phi] = 0 \quad (II - 2c)$$

$$-m^2 \phi - (\partial_i \partial^i + \partial_0 \partial^0) \phi = 0 \quad (II - 2d)$$

Et on a :

Chapitre II

$$\partial_0 = \partial^0 \text{ et } \partial_i = -\partial^i \quad (II - 2e)$$

Alors on obtient que :

$$-m^2\phi - (-\partial_i^2 + \partial_0^2)\phi = 0 \quad (II - 2f)$$

$$(m^2 + \partial_i^2 - \partial_0^2)\phi = 0 \quad (II - 2g)$$

Sachant que :

$$\partial_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \text{ Et } \partial_0^2 = (\nabla)^2 \quad (II - 2h)$$

On trouvera notre fameuse équation :

$$(\square + m^2)\phi = (\partial_t^2 - \nabla^2 + m^2)\phi = 0 \quad (II - 3)$$

Qui décrit avec succès le mouvement des particules de spin entier appelé aussi équation de Klein Gordon.

Bien cette équation joue un rôle essentiel dans la description des systèmes Bosoniques, elle présente un certain inconvénient au niveau des systèmes fermionique.

Essayant maintenant de trouver sa solution qui est du type onde plane toute en la écrivant sous la forme d'une transformée de Fourier

$$\phi_k(t, x) = \psi(t)e^{ikx} \quad (II - 4)$$

En injectant cette fonction dans l'équation (II-3) on obtient :

$$\psi_k'' + (k^2 + m^2)\psi_k = 0 \quad (II - 5)$$

Soit encore :

$$\psi_k'' + w_k^2\psi_k = 0 \quad (II - 6)$$

En notant :

Chapitre II

$$w_k^2 = k^2 + m^2 \quad (II - 7)$$

Il s'agit de l'équation d'un oscillateur harmonique qui a pour solution :

$$\psi_k(t) = a_k e^{-i w_k t} + b_k e^{i w_k t} \quad (II - 8)$$

Et donc :

$$\phi_k(t, x) = a_k e^{-i(w_k t - kx)} + b_k e^{i(w_k t + kx)} \quad (II - 9)$$

La solution générale s'obtient en intégrant sur les k :

$$\phi(t, x) = \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} (a_k e^{-i(wt - kx)} + b_k e^{i(wt + kx)}) \delta(w^2 - w_k^2) \quad (II - 10)$$

Il reste à imposer la condition de réalité : $\phi = \phi^*$. On a

$$\phi^*(t, x) = \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} (a_k^* e^{i(wt - kx)} + b_k^* e^{-i(wt + kx)}) \delta(w^2 - w_k^2) \quad (II - 11a)$$

$$\phi^*(t, x) = \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} (a_k^* e^{i(wt + kx)} + b_k^* e^{-i(wt - kx)}) \delta(w^2 - w_k^2) \quad (II - 11b)$$

Où on a fait le changement de variable $k \rightarrow -k$. L'identification des coefficients avec (II - 10) :

$$\begin{cases} a_{-k}^* = b_k \\ b_{-k}^* = a_k \end{cases} \quad (II - 12)$$

D'où :

$$\phi(x, t) = \int \frac{(d)^4 k}{(2\pi)^4} (a_k e^{-i(wt - kx)} + a_{-k}^* e^{i(wt + kx)}) \delta(w^2 - w_k^2) \quad (II - 13a)$$

$$\phi(x, t) = \int \frac{(d)^4 k}{(2\pi)^4} (a_k e^{-i(wt - kx)} + a_k^* e^{i(wt - kx)}) \delta(w^2 - w_k^2) \quad (II - 13b)$$

En faisant le changement de variable $k \rightarrow -k$ pour le deuxième terme.

Finalement, on définit le quadrivecteur :

Chapitre II

$$k^\mu = (w, k) \quad (II - 14)$$

Et on obtient la solution pour ϕ :

$$\phi(t, x) = \int \frac{(d)^4 k}{(2\pi)^4} (a_k e^{-ik} + a_k^* e^{ik}) \quad (II - 15)$$

On peut remplacer la mesure par $d^3 k$:

$$\int \frac{(d)^4 k}{(2\pi)^4} \delta(w^2 - w_k^2) = \int \frac{(d)^4 k}{(2\pi)^4} \delta((w + w_k)(w - w_k)) \quad (II - 16a)$$

$$= \int \frac{(d)^4 k}{(2\pi)^4} \frac{1}{2w_k} (\delta(w + w_k) + \delta(w - w_k)) \quad (II - 16b)$$

$$= \int \frac{(d)^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{dw}{2\pi} \frac{1}{2w_k} \delta(w - w_k) \quad (II - 16c)$$

$$= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2w_k} \quad (II - 16d)$$

Où on a utilisé le fait que $\omega \geq 0$, ainsi que la formule :

$$\delta(f(x)) = \sum_{\{x_i\}} \frac{\delta(x - \chi_i)}{|f'(\chi_i)|} \quad (II - 17)$$

Où les χ_i sont les racines de f . La solution peut donc s'écrire :

$$\phi(t, x) = \int \frac{(d)^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2w_k} (a_k e^{-i(w_k t - kx)} + a_k^* e^{i(w_k t + kx)}) \quad (II - 18)$$

On remarque que la solution n'est plus explicitement covariante sous cette forme.

En introduisant les fonctions de fréquences positive et négative

$$f^\pm(x) = e^{\mp(iw_k t - kx)} \quad (II - 19)$$

Chapitre II

On peut écrire la solution sous la forme :

$$\phi = \phi^+ = \phi^- = \int \frac{(d)^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2w_k} (a_k f_k^+(x) + a_k^* f_k^-(x)) \quad (II - 20)$$

Nous utiliserons parfois l'expression c.c. indiquant qu'il faut prendre le complexe conjugué du terme précédent :

$$\phi(x, t) = \int \frac{(d)^3}{(2\pi)^3} \frac{1}{2w_k} (a_k e^{-ikx} + c.c.) \quad (II - 21)$$

II.3 Calcul de l'hamiltonien

Cherchons l'expression de l'hamiltonien :

$$H = \int d^3x \left(\frac{1}{2} \phi'^2 + \frac{1}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{m^2}{2} \phi^2 \right) \quad (II - 22)$$

En fonction de, Commençant par calculer ϕ' et $\nabla\phi$:

$$\phi' = \int \frac{(d)^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} i (-a_k e^{-ikx} + a_k^* e^{ikx}) \quad (II - 23a)$$

$$\nabla\phi = \int \frac{(d)^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2w_k} ik (a_k e^{-ikx} - a_k^* e^{ikx}) \quad (II - 23b)$$

Il est important d'utiliser des k différents dans l'intégration. Calculons le premier terme en ϕ'^2 :

$$\int d^3x \phi'^2 = \int d^3x \left(\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} i (-a_k e^{-ikx} + c.c.) \right) \left(\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} i (-a_q e^{-iqx} + c.c.) \right) \quad (II - 24a)$$

$$= - \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{4} \int d^3x (a_k a_q e^{-i(k+q)x} - a_k a_q^* e^{-i(k-q)x} + c.c.) \quad (II - 24b)$$

Chapitre II

$$= - \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} d^3 q \frac{1}{4} (a_q a_k \delta^{(3)}(q+k) e^{-i(w_k+w_q)t} - a_k a_k^* \delta^{(3)}(q-k) e^{-i(w_k-w_q)t} c.c.) \quad (II-24c)$$

$$= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{4} (-a_k a_{-k} e^{-2i w_k t} + a_k a_k^* + c.c.) \quad (II-24d)$$

Car $w_k = w_{-k}$, et de même on trouvera que :

$$\int d^3 x (\nabla \phi)^2 = \int d^3 x \left(\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2w_k} ik (a_k e^{-ikx} + c.c.) \right) \times \left(\int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{1}{2w_q} iq (a_q e^{-iqx} - c.c.) \right) \quad (II-25a)$$

$$= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{1}{4w_k w_q} \int d^3 x (-kq) (a_q a_k e^{-i(k+q)x} - a_k a_q^* e^{-i(k-q)x} + c.c.) \quad (II-25b)$$

$$= - \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} d^3 q \frac{1}{4w_k w_q} kq (a_k a_q \delta^{(3)}(q+k) e^{-i(w_k+w_q)t} - a_k a_q^* \delta^{(3)}(q-k) e^{-i(w_k-w_q)t} + c.c.) \quad (II-25c)$$

$$= - \int \frac{d^3 x}{(2\pi)^3} \frac{1}{4w_k^2} k^2 (-a_k - a_{-k} e^{-2i w_k t} - a_k a_k^* + c.c.) \quad (II-25d)$$

Et finalement :

$$\int d^3 x \phi^2 = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{4w_k^2} m^2 (a_k a_{-k} e^{-2i w_k t} + a_k a_k^* + c.c.) \quad (II-26)$$

En rassemblant les trois termes, on obtient

$$H = \int d^3 x \left(\frac{1}{2} \phi'^2 + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{m^2}{2} \phi^2 \right) \quad (II-27a)$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{4w_k^2} \left(-w_k^2 a_k a_{-k} e^{-2iw_k t} + w_k^2 a_k a_k^* \right. \\
 &\quad \left. + (w_k^2 - m^2) a_k a_{-k} e^{-2iw_k t} + m^2 a_k a_k^* + c.c \right) \quad (III - 27b)
 \end{aligned}$$

$$= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{4w_k^2} (a_k a_k^* + a_k^* a_k) \quad (II - 27c)$$

En posant :

$$N_k = (2\pi)^3 2w_k a_k^* a_k \quad (II - 28)$$

On obtient :

$$H = \int d^3k w_k N_k \quad (II - 29)$$

$w_k N_k$ Correspond donc à la densité d'énergie par unité de k .

II.4 Quantification canonique

Quantifier le hamiltonien revient à le réécrire sous forme des opérateurs de création et d'annihilation pour mieux comprendre ce que nous devons le faire par la suite nous allons commencer par traiter un exemple simple relatif à un système de N oscillateurs harmoniques de fréquences ω_i .

Le lagrangien de ce système est :

$$\mathcal{L} = \sum_i \frac{1}{2} (p_i^2 - w_i^2 q_i^2) \quad (II - 30)$$

ce qui donnent les équations du mouvement (une par oscillateur) :

$$q'' + w_i^2 q_i = 0 \quad (II - 31)$$

qui ont pour solution :

$$q_i = a_i e^{-iw_i t} + a_i^* e^{iw_i t} \quad (II - 32a)$$

Chapitre II

$$p_i = -iw_i a_i e^{-iw_i t} + iw_i a_i^* e^{iw_i t} \quad (II - 32b)$$

Si on promeut p_i et q_i en opérateurs, alors a_i et a_i^* deviennent aussi :

$$q_i \rightarrow \hat{q}_i \quad \hat{p}_i \rightarrow \hat{p}_i \quad a_i \rightarrow \hat{a}_i \quad a_i^* \rightarrow (\hat{a}_i)^\dagger \quad (II - 33)$$

On a les relations de commutations suivantes :

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j^\dagger] = i\delta_{ij} \quad (II - 34a)$$

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (II - 34b)$$

Calculons le commutateur de \hat{a}_i et \hat{a}_i^\dagger à partir de celui de \hat{q}_i et \hat{p}_i^\dagger :

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_i^\dagger] = [\hat{a}_i e^{-iw_i t} + \hat{a}_i^\dagger e^{iw_i t}, -iw_i \hat{a}_i e^{-iw_i t} + iw_i \hat{a}_i^\dagger e^{iw_i t}] \quad (II - 35a)$$

$$= iw_i [\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] - iw_i [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i] \quad (II - 35b)$$

$$= 2iw_i [\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] = i \quad (II - 35c)$$

Tous les autres commutateurs seront nuls à cause des relations de commutations (II - 34):

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \frac{1}{2} w_i \delta_{ij} \quad (II - 36a)$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0 \quad (II - 36b)$$

II.5 L'hamiltonien

L'hamiltonien du système s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_i w_i \left(\hat{N}_i + \frac{1}{2} \right) \quad (II - 37)$$

Avec :

Chapitre II

$$\hat{N}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (II - 38)$$

Un état ψ se décompose sur la base des états propres $|n_i\rangle$ de \hat{N}_i

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_{n_1, \dots, n_N} |n_1 \dots n_N\rangle \quad (II - 39)$$

Traitant maintenant notre cas :

Si i désigne l'indice continu, on obtient le champ de Klein–Gordon et à partir de la relation de commutation à temps égal (en se rappelant que $\pi = \dot{\phi}$) on obtient :

$$[\hat{\phi}(t, x), \hat{\pi}(t, \dot{x})] = i\delta^{(3)}(x - \dot{x}) \quad (II - 40a)$$

$$[\hat{\phi}(t, x), \hat{\phi}(t, \dot{x})] = [\hat{\pi}(t, x), \hat{\pi}(t, \dot{x})] = 0 \quad (II - 40b)$$

Et avec analogie nous aurons :

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(k - k') 2w_k \delta^{(3)}(k - k') \quad (II - 41a)$$

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger] = 0 \quad (II - 41b)$$

On a les déférentes relations (avec $|\psi\rangle = |n_{k_1} \dots \dots n_{k_N}\rangle$) :

$$\hat{a}_k |0\rangle_k = 0 \quad (II - 42a)$$

$$(\hat{a}_k^\dagger)^{n_k} = |n_k\rangle \quad (II - 42b)$$

$$\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = n_k |n_k\rangle \quad (II - 42c)$$

$$\hat{N}_{k_1} |\psi\rangle = n_{k_1} |n_{k_1}\rangle \quad (II - 42d)$$

$$\hat{N} |\psi\rangle = (n_{k_1} + \dots + n_{k_N}) |\psi\rangle \quad (II - 42e)$$

Le nombre total d'excitation est donné par :

Chapitre II

$$\hat{N} = \int d^3k \hat{N}_k \quad (II - 43)$$

Un seul champ permet de décrire plusieurs particules, par exemple :

- une particule : $|n_k 0 0 \dots\rangle$.
- deux particules : $|n_{k_1} n_{k_2} 0 \dots\rangle$.

Partant de l'expression (II - 29) on obtient l'hamiltonien :

$$\hat{H} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{4w_k} w_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger) \quad (II - 44a)$$

$$= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{4w_k} w_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + [\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger]) \quad (II - 44b)$$

$$= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{4w_k} w_k (2\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + (2\pi)^3 2w_k \delta^{(3)}(0)) \quad (II - 44c)$$

$$= \int d^3k w_k \hat{N}_k + \frac{1}{2} \int d^3k w_k \delta^{(3)}(0) \quad (II - 44d)$$

Où on a :

$$H_0 = \frac{1}{2} \int d^3k w_k \delta^{(3)}(0) \quad (II - 45)$$

Le deuxième terme H_0 du membre de droite est infini mais constant : on redéfinit l'origine des énergies de sorte que ce terme vaut zéro :

$$H_0 |0\rangle = E_0 |0\rangle \quad (II - 46)$$

Plaçons le système dans un volume fini V , alors on aura :

$$H_0 = \int d^3k 2 w_k \delta^{(3)}(0) \rightarrow H_0 = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} 2w_k V \quad (II - 47)$$

Car :

Chapitre II

$$\int d^3x e^{ikx} = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(k) = \int d^3x = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(k=0) \quad (II - 48)$$

Mais cette expression diverge pour k grand (divergence UV).

On définit une fréquence de coupure Λ :

$$\varepsilon_0 = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} 2w_k \quad tq: |k| < \Lambda \quad (II - 49)$$

Cette expression diverge comme Λ^4 .

On a :

$$\hat{H} |n_1 \dots n_N\rangle = \int d^3k w_k \hat{N}_k |n_1 \dots n_N\rangle \quad (II - 50)$$

Et :

$$\hat{N}_k |n_1 \dots n_N\rangle = (n_1 \delta^{(3)}(k - k_1) + \dots + n_N \delta^{(3)}(k - k_N)) |n_1 \dots n_N\rangle \quad (II - 51)$$

Ce qui donne :

$$\hat{H} |n_1 \dots n_N\rangle = \sum_i w_i n_i |n_1 \dots n_N\rangle \quad (II - 52)$$

Ou bien :

$$E = \sum_i w_i n_i \quad (II - 53)$$

L'impulsion p est :

$$\hat{p} = \int d^3x (-\phi' \nabla \phi) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k \hat{N}_k \quad (II - 54)$$

Et :

Chapitre II

$$\hat{p}|n_1 \dots n_N\rangle = \sum_i n_i k_i |n_1 \dots n_N\rangle \quad (II - 55)$$

Et finalement :

$$\hat{H}|p\rangle = w_p |p\rangle \quad (II - 56)$$

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad (II - 57)$$

avec $w_p = \sqrt{k^2 + m^2}$.

Après avoir présenté notre théorie quantique, nous allons maintenant passer aux calculs numériques tout en se reposant sur tout ce que nous avons vu aux chapitres précédents.

Chapitre II

Référence II :

- [1] Itzykson C. & Zuber J.-B. (1980), Quantum Field Theory (McGraw-Hill, New York), 705 pages. Ou: International Student Edition (McGraw-Hill, Singapore, 1985).
- [2] Weinberg S. (1995–6), The Quantum Theory of Fields. Volume I: Foundations (Cambridge University Press, Cambridge, 1995), 609 pages. Volume II: Modern Applications (Cambridge University Press, 1996), 489 pages.
- [3] Ramond P. (1990), Field Theory: a Modern Primer, second edition (Addison-Wesley, Redwood City), 329 pages.
- [4] Bjorken J. D. & Drell S. D. (1964), Relativistic Quantum Mechanics (McGraw-Hill, New York), 300 pages.
- [5] Peskin M. E. & Schroeder D. V. (1995), An Introduction to Quantum Field Theory (Addison-Wesley, Reading), 842 pages
- [6] Aitchison I. J. R. & Hey A. J. G. (1989), Gauge Theories in Particle Physics, second edition (Adam Hilger, Bristol), 571 pages.
- [7] Livre Théorie des champs classiques Harold Erbin Notes de cours de Magistère M1, donné par M. Nitti. <http://artlibre.org/licence/lal/>
- [8] Livre Théorie quantique des champs . Jean-Pierre Derendinger
- [9] B. F. Schutz “A first course in general relativity”, (UK : Cambridge University Press, 1985) 132
- [10] A. Einstein “Zur Elektrodynamik bewegter Körper”, *Ann. Phys.* **17**, 891–921 (1905) 12, 132
- [11] A. I. Miller, “Albert Einstein’s special theory of relativity”, (New York : Springer 1998) 132
- [12] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et G. Grynberg « Photons et

Chapitre II

atomes. Introduction `a l'`electrodynamique quantique », (Paris: Inter-Editions et `Editions du CNRS 1987) 132

[13] R. P. Feynman & A. R. Hibbs, “Quantum Mechanics and Path Integrals”, (New York : McGraw-Hill 1965) 132

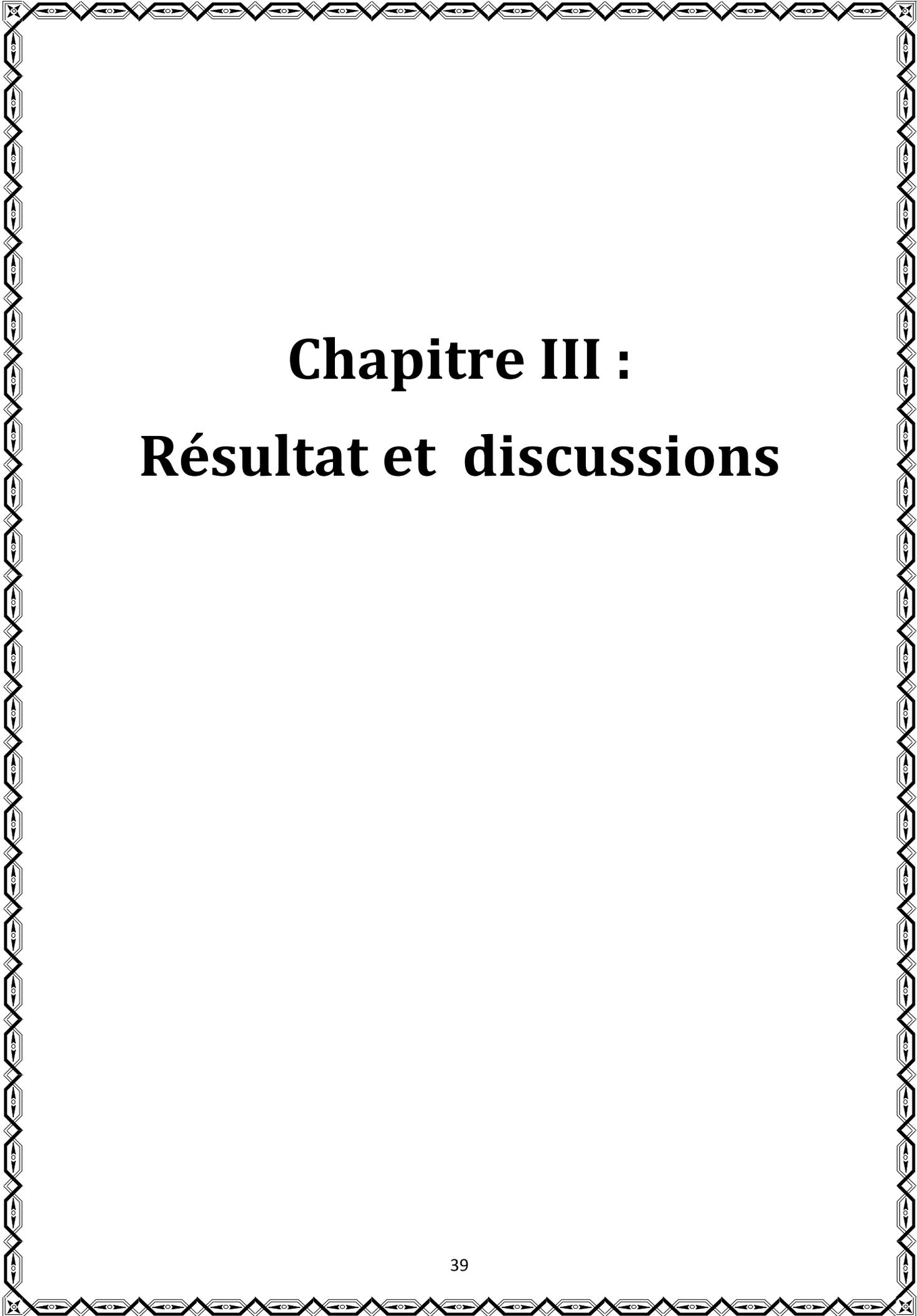
[14] The Quantum Theory of Fields, Volume I Foundations, Steven Weinberg, Cambridge University Press.

[15] An introduction to Quantum Field Theory, M. Peskin and D. Schroeder, Addison-Wesley

[16] Quantum Field Theory in a nutshell, A. Zee, Princeton University Press.

[17] Quantum Field Theory, Mark Srednicki, Cambridge University Press.

[18] An introduction to Quantum Field Theory, George Serman, Cambridge University Press.



Chapitre III :

Résultat et discussions

III.1 introduction

Nous arrivons maintenant à la partie la plus laborieuse de notre travail où nous allons convertir tout ce que nous avons vu aux chapitres I et II, les équations théoriques, aux équations numériques accessible aux calculs.

Résoudre ces équations numériquement revient à construire un organigramme de calcul inspirés par un programme écrit en fortran 77 qui repose sur la méthode d'Euler. Nous utilisons alors, notre algorithme basé :

III.2 Méthode des différences finies

Pour résoudre numériquement l'équation de Klein-Gordon , il semble pertinent d'appliquer la méthode de discrétisation de l'espace et des opérateurs. Sous les hypothèses que $\Psi(x)$ est au moins de classe C^2 , un développement de Taylor nous permet d'écrire les deux égalités suivantes [1différence finie]:

$$\Psi(x + h) - \Psi(x) = h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^3) \quad (III - 1)$$

$$\Psi(x - h) - \Psi(x) = -h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^3) \quad (III - 2)$$

Le somme de ces deux égalités :

$$\frac{\Psi(x + h) + \Psi(x - h) - 2\Psi(x)}{h^2} = \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^2) \quad (III - 3)$$

Apparait alors équivalent discret de l'opérateur Δ (à une dimension, mais le cas à trois dimensions s'en déduit aisément). La précision de cette expression est en $O(h^2)$.

Chapitre III

En discrétisant l'espace d'un pas "h" et en injectant le résultat précédent dans l'équation de Klein-Gordon , il vient :

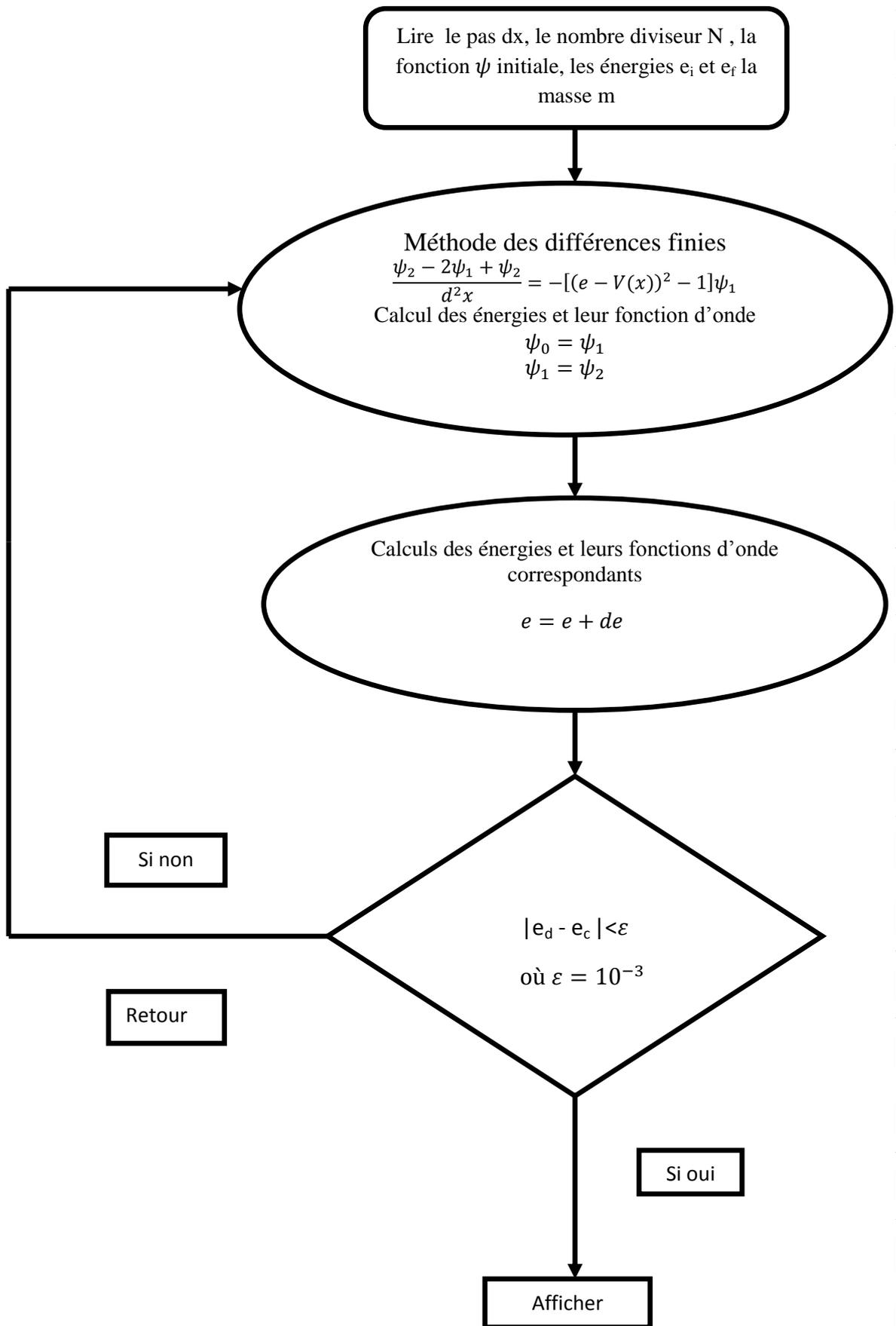
$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} + f(x)\Psi(x) + O(h^2) = 0 \quad (III - 4)$$

$$\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x) + h^2f(x)\Psi(x) + O(h^4) = 0 \quad (III - 5)$$

Cette équation peut être réécrite de façon à faire apparaître une relation de récurrence entre les valeurs de Ψ aux nœuds du maillage. Le pas de la discrétisation est fixé à h et l'origine est définie par le point O.

Lors de la résolution numérique, l'algorithme débute à $x = -2h$. La connaissance des deux premières valeurs de Ψ_n (il s'agit de l'onde plane écrite précédemment) permet d'initier la récurrence qui donne accès à tous les Ψ_n .

III.3 Organigramme de calcul :



Chapitre III

Nous commencerons par la résolution de l'équation Klein-Gordon dans deux cas différents :

- Le cas où le potentiel est nul, la particule serait libre.
- Le cas où le potentiel à une forme harmonique, la particule serait maintenant liée.

Revenons maintenant à notre fameuse équation:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2\right)\psi(x) = 0 \quad (III - 6)$$

Cette équation équivalents la forme suivants :

$$(P^2 + m^2 - E^2)\psi(x, t) = 0 \quad (III - 7)$$

Car :

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} = \frac{E^2}{-\hbar^2} \text{ et } \nabla^2 = \frac{P^2}{-\hbar^2} \quad (III - 8)$$

Pour simplifier on a pris les unités suivantes (unité choisie en théorie des champs) :

$$\hbar = c \equiv 1$$

Revenons à ce que nous avons discutés dans l'organigramme et essayons à nouveau de re-déterminer les dérivées secondes de notre fonction :

$$\psi(x + a) = \psi(x) + a \frac{d}{dx} \psi(x) + \frac{a^2}{2!} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \quad (III - 9)$$

$$\psi(x - a) = \psi(x) - a \frac{d}{dx} \psi(x) + \frac{a^2}{2!} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \quad (III - 10)$$

On faisant l'addition (III - 9) et (III - 10) nous obtenons :

Chapitre III

$$\psi(x + a) + \psi(x - a) = 2\psi(x) + a^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{\psi(x + a) + \psi(x - a) - 2\psi(x)}{a^2} \quad (III - 11)$$

En appliquant ce résultat à notre fonction $\psi(x, t)$, on aura :

$$\psi(x, t) \equiv \psi(i, j) \quad (III - 12)$$

Ou i varie de 1 à N :

Le Laplacien s'écrit :

$$D1 = \Delta\psi(x, t) = \Delta\psi(i, j) = \frac{\psi(i + 1, j) + \psi(i - 1, j) - 2\psi(i, j)}{h^2} \quad (III - 13)$$

De la même manière faisant varier j de 1 à N le Laplacien correspondant est :

$$D2 = \frac{\partial^2 t}{\partial t^2} \psi(x, t) = \frac{\partial^2 t}{\partial t^2} \psi(i, j) = \frac{\psi(i, j + 1) + \psi(i, j - 1) - 2\psi(i, j)}{h^2} \quad (III - 14)$$

Avec :

$$x_f = x_i + Nh \quad (III - 14a)$$

$$t_f = t_i + Nh \quad (III - 14b)$$

Le pas se calcule par :

$$h = \frac{x_f - x_i}{N} \quad (III - 14c)$$

L'équation de Klein Gordon deviendrait pour un cas libre :

$$(D2 - D1 + m^2)\psi(x, t) = 0 \quad (III - 15)$$

Et à partir de ceci (III - 15) on peut déduire la cas lié ou la particule est totalement liée :

Chapitre III

$$[P^2 + m^2 - (E - V(x))^2]\varphi(x) = 0 \quad (III - 16)$$

Ou :

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (III - 17)$$

On peut dire aussi que cette dernière équation (III - 17) représente une translation dans l'axe des énergies.

III.5 Calcul numérique :

L'équation à résoudre est :

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \Delta \psi + \frac{(mc)^2}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (III - 18)$$

Or on sait que:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\frac{E^2}{c^2} \psi \quad (III - 19)$$

L'équation se simplifie à :

$$\Delta \psi = \left(-\frac{E^2}{c^2} + \frac{(mc)^2}{\hbar^2} \right) \psi \quad (III - 20)$$

Utilisons les unités suivantes (unité choisie en T.Q) :

$$c = m = \hbar \equiv 1$$

En se reposant sur la méthode des différences finies, la solution s'écrit :

$$\psi_n = 2\psi_{n-1} - \psi_{n-2} - (dx)^2 \left((E - V(x))^2 - 1 \right) \psi_{n-1} \quad (III - 21)$$

Et comme conditions initiales on a:

$$\text{Pour } n \text{ pair} \quad \psi_n(0) = 1, \quad \psi_n(dx) = 1 \quad (III - 22)$$

$$\text{pour } n \text{ impair} \quad \psi_n(0) = 0, \quad \psi_n(dx) = dx \quad (III - 23)$$

Chapitre III

L'énergie non relativiste est donnée par:

$$e_{nr} = E - 1 \quad (III - 24)$$

Les énergies de l'oscillateur harmonique sont données par :

$$E_{har} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (III - 25)$$

x est calculé en fonction de la longueur de l'oscillateur harmonique

$$d = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \sqrt{\frac{1}{m\omega}} \quad (III - 26)$$

III.6 Discussions des résultats

III.6.1 Le cas libre

III.6.1.1 Représentation de la fonction d'onde d'une particule libre

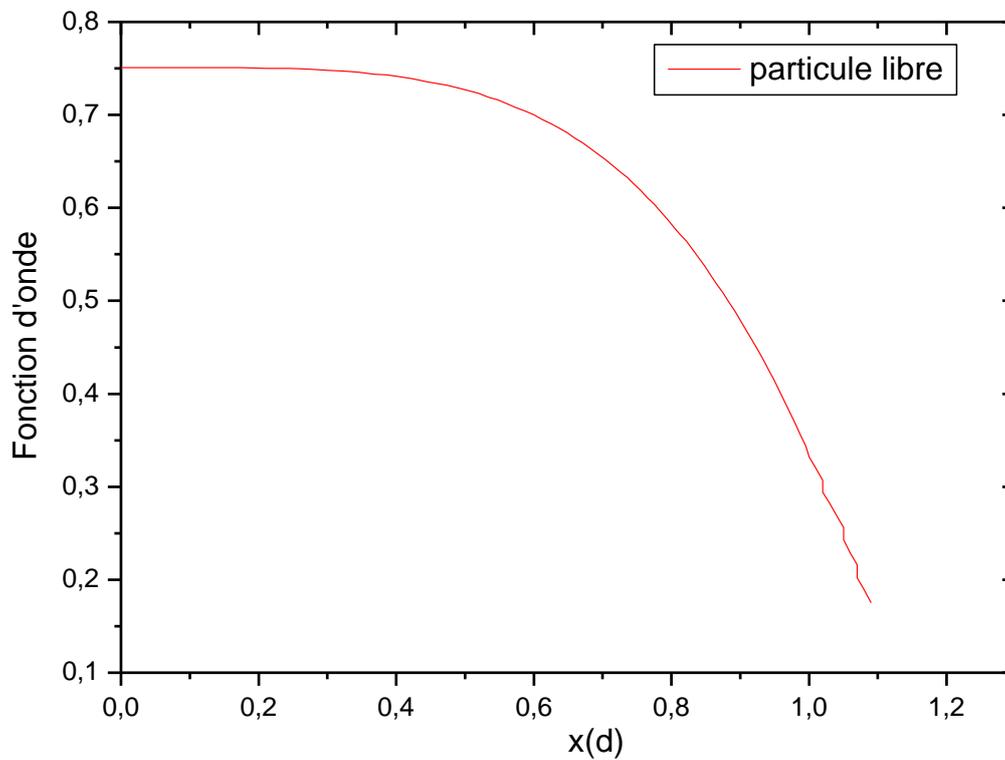


Figure III-1 : Variation de la fonction d'onde d'une particule libre

La forme de la fonction d'onde via cette figure(III-1) est de nature Gaussienne maximale pour $x=0$ et commence à diminuer au fur à mesure que x augmente. la particule est soumise seulement à son énergie cinétique et une accélération est remarqué au niveau du bord.

III.6.1.2 Représentation de la densité de particule libre

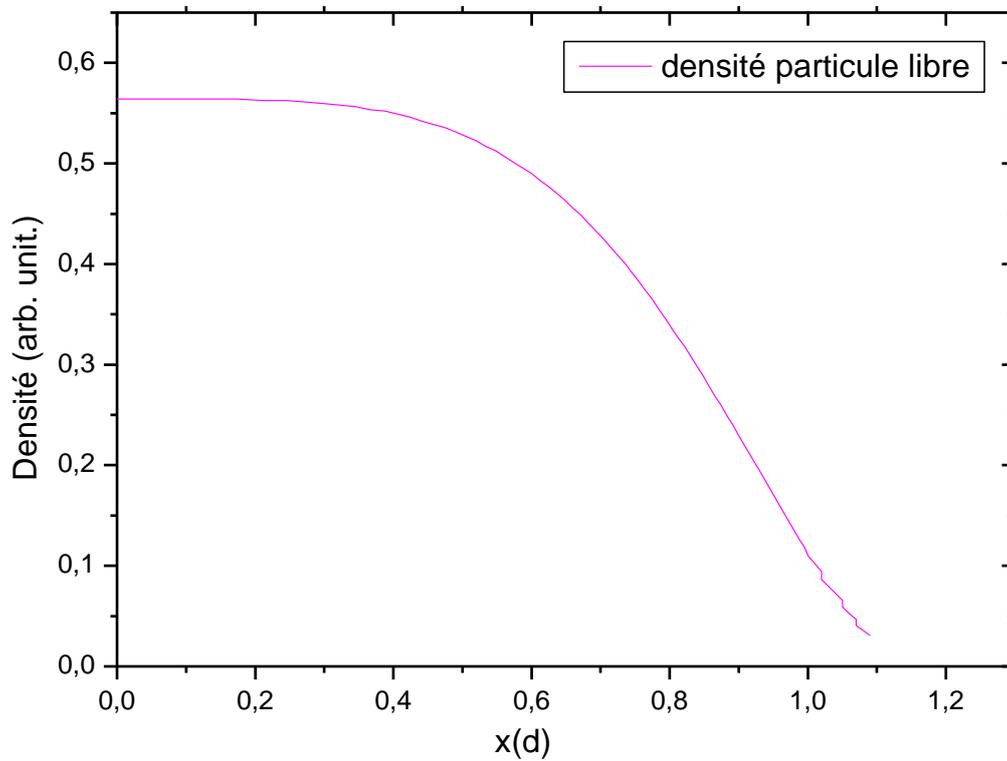


Figure III-2 : Présentation de la densité d'une particule libre.

La figure (III-2) montre la variation de la densité pour une particule libre. On remarque que la probabilité est maximale au centre du piège et s'annule au bord.

III.6.2 Cas liée :

III.6.2.1 Représentation de la fonction d'onde d'une particule liée

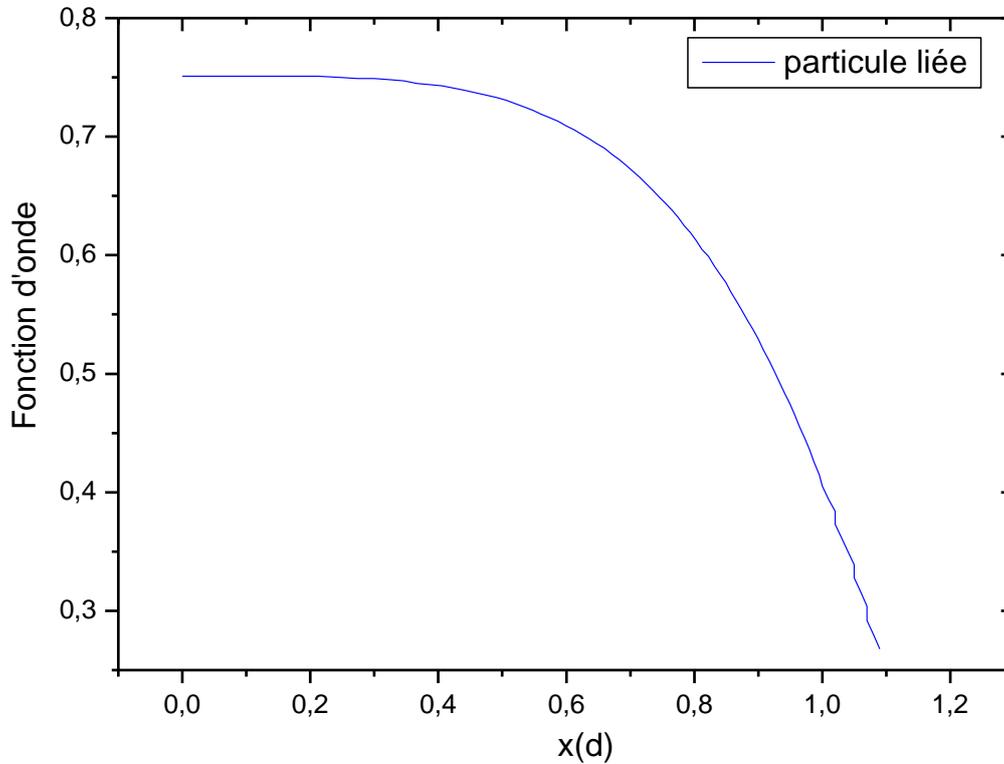


Figure III-3 : Variation de la fonction d'onde d'une particule liée

La forme de la fonction d'onde via cette figure (III-3) est de nature Gaussienne maximale pour $x=0$ et commence à diminuer au fur à mesure que x augmente. L'effet du piège est de ralentir cette diminution.

III.6.2.2 Présentation de la densité d'une particule liée

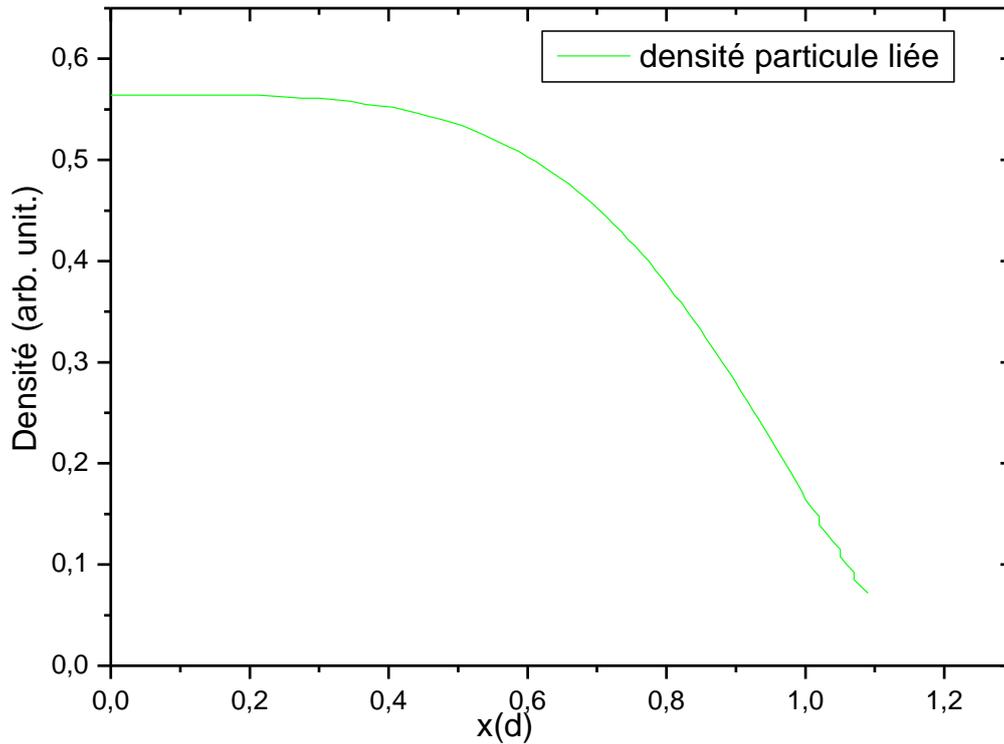


Figure III-4 : Présentation de la densité d'une particule liée

La figure (III-4) montre la variation de la densité pour une particule liée. La même forme est donnée par cette densité. La probabilité est maximale au centre du piège et s'annule au bord.

III.6.3 Comparaison des fonctions d'onde relativement au deux cas

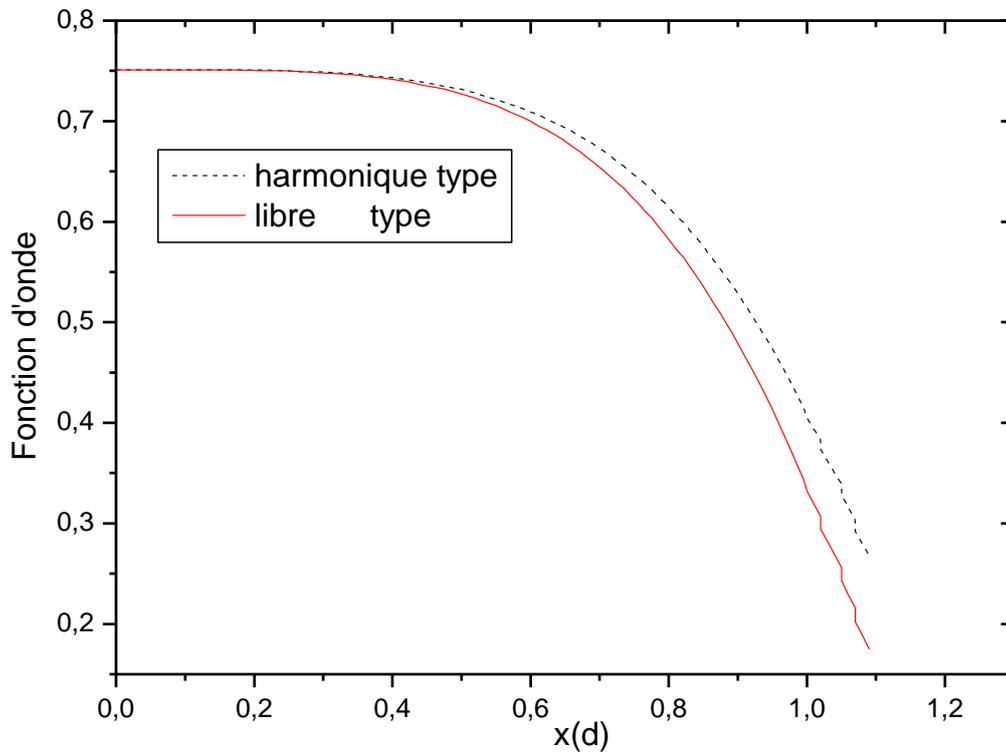


Figure III-5 : Comparaison des deux fonctions d'ondes :

courbe en ligne particule libre ; courbe en pointillé particule liée.

D'après cette figure (III-5), on peut conclure que pour une particule libre la fonction d'onde tend à s'annuler facilement, et l'effet du piège harmonique est de ralentir l'accélération de la fonction d'onde au niveau du bord.

Pour $x=0$ on remarque bien que la fonction d'onde inspiré par le potentiel harmonique et le potentiel nul est la même.

III.6.4 Comparaison avec d'autres travaux

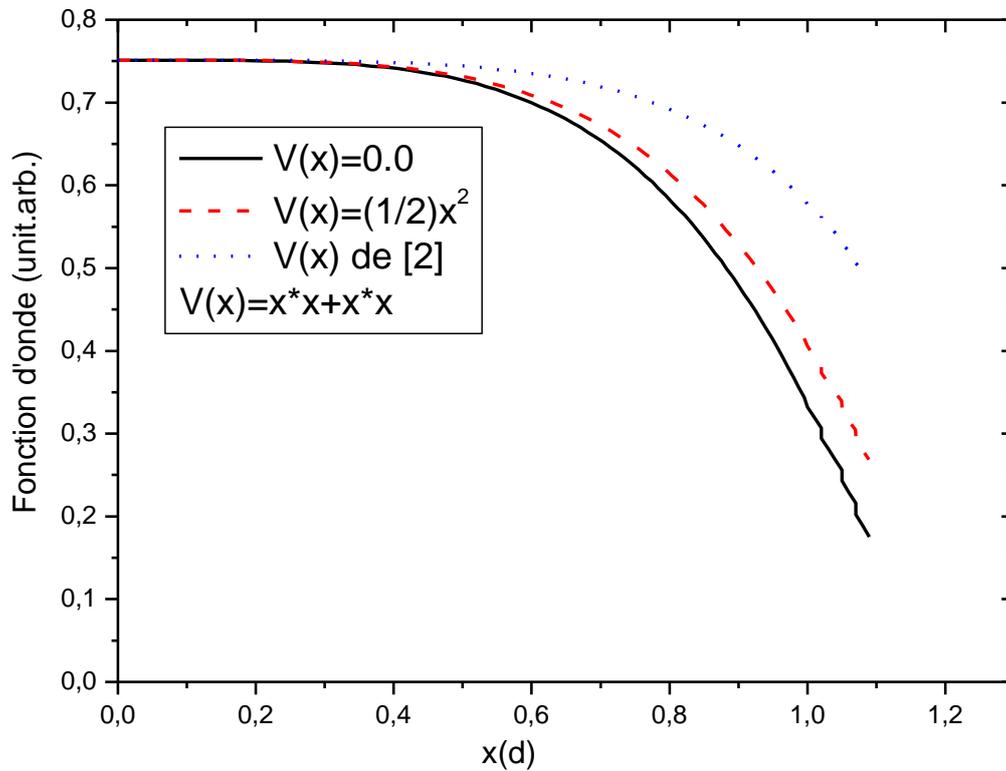


Figure III-6 : Comparaison des fonctions d'ondes :

courbe en ligne (noir) $V=0$. ; courbe en pointillé (bleu) $V=2*x*x$ [2] et courbe en tiret (rouge) $V=1/2*x*x$.

D'après cette figure (III-6) on observe bien qu'il y a une bonne tendance de mes résultats via les résultats trouvés par [2] cela me laisse à dire que notre travail converge vers des bons résultats.

III.7 La résolution analytique

La résolution analytique de l'équation de Klein-Gordon via un potentiel harmonique repose sur la détermination du vecteur d'onde k dont l'expression est :

$$k^2 = 1 - (E - V(x))^2 \quad (III - 27)$$

Où :

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = k^2 \psi(x) \quad (III - 28)$$

Qui représente l'équation du mouvement à une dimension

On distingue trois cas possibles :

Le cas où :

$$k^2 = (0.5)^2 \quad (III - 29)$$

A trois dimensions on réécrit l'équation (III-28) sous la forme :

$$\Delta_r \psi(r) = k^2 \psi(r) \quad (III - 30)$$

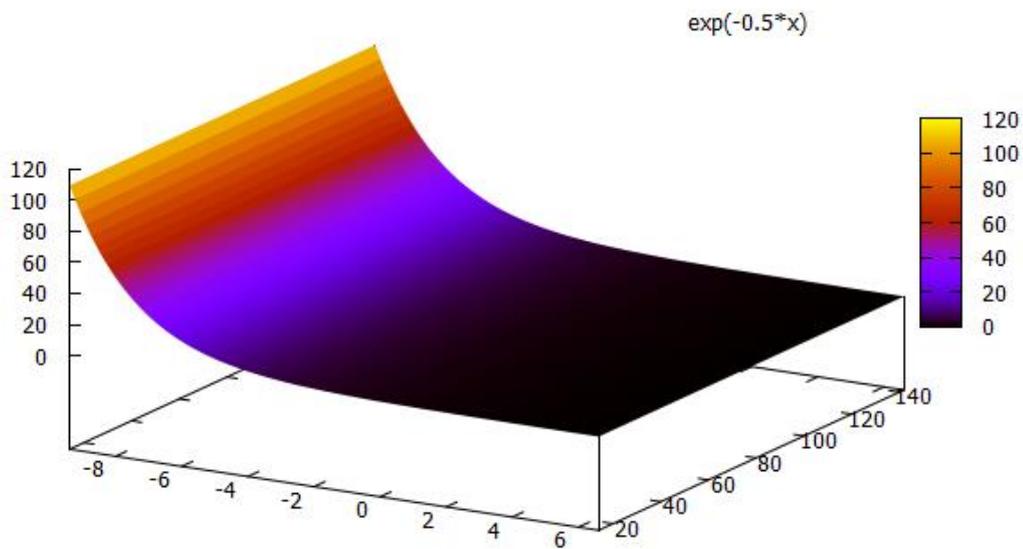


Figure III-7: Représentation de la fonction d'onde à 3d pour le cas où L'énergie est inférieure devant le potentiel.

La figure (III-7) montre la représentation de la fonction d'onde dans l'espace à trois dimensions où l'étude analytique nous donne :

$$E = V(r) - (1 - 0.5) \quad (III - 31)$$

On remarque bien que la probabilité est maximale au centre du piège $x=0$ et commence à diminuer au fur à mesure qu'on s'éloigne du centre.

Le cas où :

$$k^2 = (i0.5)^2 \quad (II - 32)$$

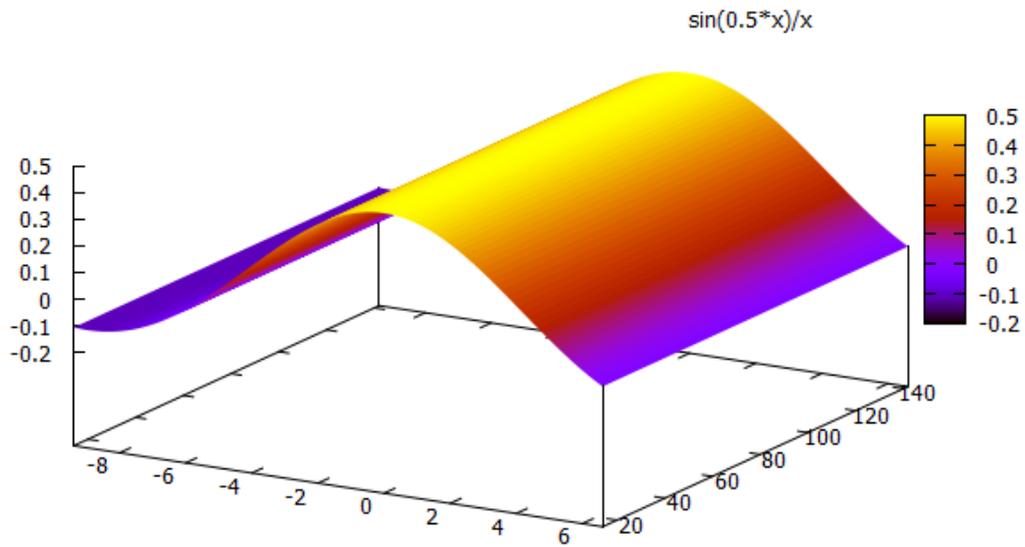


Figure III-8: Représentation de la fonction d'onde à 3d pour le cas où

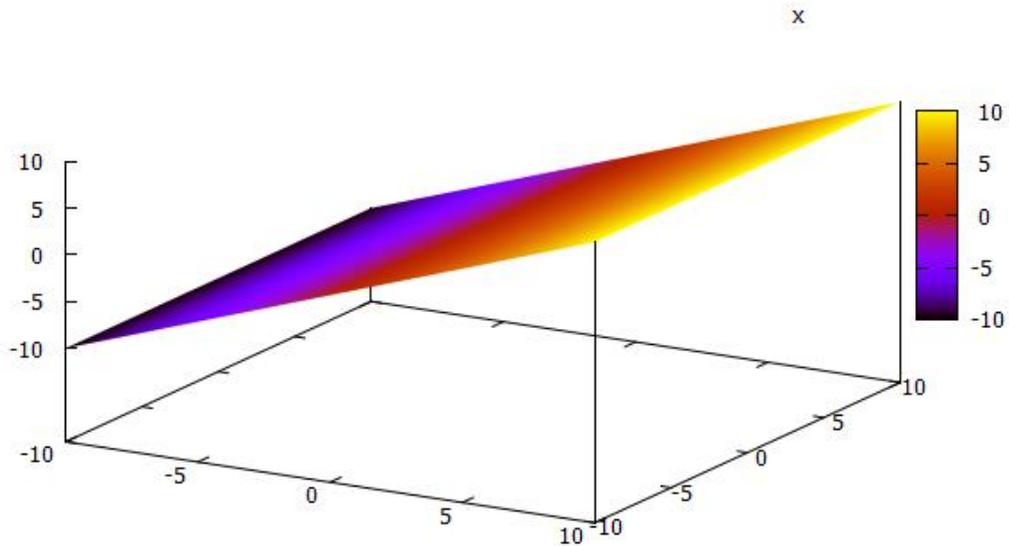
L'énergie est supérieure devant le potentiel.

Pour ce cas, la détermination de la variation de l'énergie nous donne:

$$E = V(r) + (1 + 0.5) \quad (III - 33)$$

Le cas :

$$k^2 = 0 \quad (III - 34)$$



**Figure III-9: Représentation de la fonction d'onde à 3d pour le cas où
L'énergie est comparable au potentiel.**

Pour ce dernier cas :

$$E = V(r) + (1 + 0.0) \quad (III - 35)$$

La figure (III-9) nous donne la variation de la fonction d'onde pour des énergies comparables au potentiel ceci est rejeté physiquement car il n'ya pas une absorption ou une réflexion au niveau de ce cas.

Chapitre III

Référence III:

- [1] Grégoire ALLAIRE. Analyse numérique et optimisation. Eds de l'École Polytechnique, 2007
- [2] T. Barakat, Phys. Lett. A **344** 411-417 (2005).
- [3] T. Barakat, Journal Mod. Phys. A **22** 203-212 (2007).

Conclusion

Ce travail de mémoire a été pour moi l'occasion d'aborder un certain nombre de solutions de l'équation de Klein Gordon via des calculs numériques.

Avec l'invention de l'ordinateur, qui a permis d'élargir largement les possibilités d'applications, la programmation est devenue l'un des étapes essentielles pour déterminer la solution de beaucoup de problème non seulement en physique mais dans toutes les sciences.

Nous avons en effet proposé de simplifier autant que possible la fonction Lagrangienne d'un champ scalaire libre et lié via les équations d'Euler Lagrange.

L'équation de Klein Gordon était notre premier pas d'aborder ce travail d'une manière rigoureuse. Sa solution numérique nous renseigne sur l'état de la fonction d'onde ainsi que sur sa densité de probabilité via des potentiels de type harmonique et afin de réaliser cet objectif nous avons dans un premier temps développé les lagrangiens des systèmes physiques en particulier pour un champ scalaire libre de deux façons différentes dont la première était classique mais elle ne permet pas d'aboutir à notre fameuse équation qui purement relativiste et dans la deuxième était quantique où on a utilisé des développements quantiques dans l'espace de Fock.

Cette forme nous a permis de réduire le hamiltonien à une quantité quantique qui s'écrit comme fonction des opérateurs de création et d'annihilation agissant sur l'espace des opérateurs.

Notre dernière étape était basée sur la programmation où on écrit des programmes inspirés par le langage fortran 77 et à ce stade nous avons pu résoudre cette fameuse équation d'une manière numérique.

Enfin nous avons présentés nos résultats numériques via d'autres travaux donnés par les références [1-2] où la conclusion était un bon accord avec ces derniers.

[1] T. Barakat, Phys. Lett. A **344** 411-417 (2005).

[2] T. Barakat, Journal Mod. Phys. A **22** 203-212 (2007).