

Introduction générale

27.1.87

Thème choisi

Etude de diverses formulations équivalentes de l'Electrodynamique Quantique.

On analysera les motivations qui sont à l'origine de ces formulations, leurs avantages et inconvénients respectifs et les éclairages physiques qu'elles donnent sur les processus d'interaction entre matière et rayonnement

L'accent sera mis sur les interprétations physiques et l'enchaînement des idées, le détail des calculs pouvant être trouvé dans le livre

"Photons et Atomes - Introduction à l'Electrodynamique Quantique" par C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg InterEditions, Paris 1987, à paraître.

Le système étudié en Electrodynamique : Particules + Champ

- Evolution couplé
Dynamique quantique correspondant à celle décrite par les équations de Maxwell - Lorentz
- Cas particuliers plus simple
Particules quantiques couplés à un "champ extérieur"
Champ quantique couplé à des "sources extérieures"
(L'un des 2 sous-systèmes a une évolution temporelle donnée)

Description des 2 sous-systèmes - Variables dynamiques

① Particules

- Description non relativiste
Nombre fixe de particules indexés par α et décrites par leurs positions \vec{r}_α et leurs vitesses \vec{v}_α (ou leurs impulsions \vec{p}_α)
Etat quantique décrit par des fonctions d'onde de Schrödinger ou des spineurs de Pauli
- Description relativiste
Théorie classique : champ de matière relativiste couplé au champ de Maxwell (exemple du champ de Dirac).
Théorie quantique : les excitations élémentaires du champ de matière quantifié décrivent les particules qui sont en nombre indéterminé (par exemple, les électrons et les positrons sont les excitations élémentaires du champ de Dirac quantifié).

② Description du champ électromagnétique par les champs \vec{E} et \vec{B}

- a) Etat du champ à un instant t_0 donné
- Défini par la donnée des champs \vec{E} et \vec{B} en tout point \vec{r}

$$\{ \vec{E}(\vec{r}, t_0), \vec{B}(\vec{r}, t_0) \} \text{ pour tout } \vec{r} \quad (1)$$

(Les équations de Maxwell pour \vec{E} et \vec{B} sont du 1^{er} ordre en t)

- On a l'impression qu'il faut se donner en chaque point \vec{r} 6 composantes réelles $E_x, E_y, E_z, B_x, B_y, B_z$
En fait, ces 6 composantes ne sont pas réellement indépendantes, comme nous allons le voir.

b) Passage de l'espace réel à l'espace réciproque

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \vec{E}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (2)$$

$$\vec{E}(\vec{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r \vec{E}(\vec{r}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (3)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}^*(\vec{r}, t) \implies \vec{E}(\vec{k}, t) = \vec{E}^*(-\vec{k}, t) \quad (4)$$

Equations de Maxwell dans l'espace réciproque

$$i\vec{k} \cdot \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho \quad (5a)$$

$$i\vec{k} \cdot \vec{B} = 0 \quad (5b)$$

$$i\vec{k} \times \vec{E} = -\dot{\vec{B}} \quad (5c)$$

$$i\vec{k} \times \vec{B} = \frac{1}{c^2} \dot{\vec{E}} + \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \vec{J} \quad (5d)$$

c) Champs vectoriels longitudinaux et transverses

- Champ longitudinal $\vec{V}_{||}(\vec{k})$

$$\vec{k} \times \vec{V}_{||}(\vec{k}) = \vec{0} \quad \forall \vec{k} \quad \text{ou} \quad \vec{V}_{||}(\vec{k}) \text{ parallèle à } \vec{k} \quad \forall \vec{k} \quad (6)$$

- Champ transverse $\vec{V}_{\perp}(\vec{k})$

$$\vec{k} \cdot \vec{V}_{\perp}(\vec{k}) = 0 \quad \forall \vec{k} \quad \text{ou} \quad \vec{V}_{\perp}(\vec{k}) \text{ perpendiculaire à } \vec{k} \quad \forall \vec{k} \quad (7)$$

- Signification géométrique claire dans l'espace réciproque (dans l'espace réel, $\vec{\nabla} \times \vec{V}_{||} = \vec{0}$, $\vec{\nabla} \cdot \vec{V}_{\perp} = 0$ pour tout \vec{r})

d) Parties longitudinales des champs \vec{E} et \vec{B}

$$(5b) \rightarrow \vec{B}_{||} = \vec{0} \quad (8)$$

$$(5a) \rightarrow \vec{E}_{||}(\vec{k}) = -\frac{i\vec{k}}{\epsilon_0 k^2} \rho(\vec{k}) \quad (9)$$

Par transformation de Fourier, le produit de $-i\vec{k}/\epsilon_0 k^2$ et $\rho(\vec{k})$ devient un produit de convolution des T.F. de ces 2 fonctions

$$\vec{E}_{||}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \rho(\vec{r}') \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \quad (10)$$

La partie longitudinale du champ \vec{E} à l'instant t est le champ électrostatique créé par la distribution de charges $\rho(\vec{r}, t)$ figée à cet instant. Donc, la partie longitudinale de \vec{E} est connue si l'on connaît les positions des particules. Ce n'est pas une variable indépendante.

e) Conclusion sur le nombre de degrés de liberté indépendants en chaque point \vec{k} de l'espace réciproque

- Les variables indépendantes sont les 2 composantes transverses

de $\vec{E}(\vec{k})$ et $\vec{B}(\vec{k})$ (c.à.d \perp à \vec{k}) en chaque point \vec{k}
soit en tout 4 composantes complexes

- A cause des contraintes de réalité (4), les 4 composantes en \vec{k} sont reliées aux 4 composantes en $-\vec{k}$. Donc, pour l'ensemble des points \vec{k} et $-\vec{k}$, 4 composantes complexes indépendantes. Soit en tout 2 composantes complexes (ou 4 composantes réelles) indépendantes en chaque point \vec{k}

- Interprétation quantique : fonction d'onde, dans l'espace réciproque, d'une particule de spin 1 dont l'hélicité (projection du spin \vec{S} sur \vec{k}) ne prend que les valeurs $+\hbar$ et $-\hbar$ (la valeur 0 étant exclue à cause de la transversalité)

③ Description du champ électromagnétique par les potentiels \vec{A} et U

a) Importance de cette description

Dans la formulation lagrangienne ou hamiltonienne, et en théorie quantique, ce sont les potentiels vecteur \vec{A} et scalaire U et non les champs \vec{E} et \vec{B} qui apparaissent.

Comme les équations de Lagrange sont du 2^{ème} ordre en t vis à vis de \vec{A} et U , l'état du champ est défini à t_0 par la donnée de

$$\{ \vec{A}(\vec{r}, t_0), \dot{\vec{A}}(\vec{r}, t_0), U(\vec{r}, t_0), \dot{U}(\vec{r}, t_0) \} \text{ pour tout } \vec{r} \quad (11)$$

Il semble y avoir 8 degrés de liberté réels en chaque point. Or, on a vu plus haut qu'il n'y a que 4 degrés de liberté réels indépendants. Il est donc clair qu'il y a de nombreuses variables redondantes dans la description du champ par \vec{A} et U .

b) Liens entre champs et potentiels

$$\begin{cases} \vec{E} = -\dot{\vec{A}} - \nabla U & (12a) \\ \vec{B} = \nabla \times \vec{A} & (12b) \end{cases}$$

$$\text{ou } \begin{cases} \vec{E} = -\dot{\vec{A}} - i\vec{k}U & (13a) \\ \vec{B} = i\vec{k} \times \vec{A} & (13b) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \vec{E}_{||} = -\dot{\vec{A}}_{||} - i\vec{k}U & (14a) \\ \vec{E}_{\perp} = -\dot{\vec{A}}_{\perp} & (14b) \end{cases}$$

c) Changement de jauge

- les potentiels $\{ \vec{A}, U \}$ et $\{ \vec{A}', U' \}$ avec

$$\begin{cases} \vec{A}' = \vec{A} + \nabla F & (15a) \\ U' = U - \frac{\partial F}{\partial t} & (15b) \end{cases}$$

$$\text{ou } \begin{cases} \vec{A}' = \vec{A} + i\vec{k}F & (16a) \\ U' = U - \dot{F} & (16b) \end{cases}$$

où F est une fonction quelconque décrivant les mêmes champs physiques \vec{E} et \vec{B}

- De (16a) il découle que

$$\vec{A}'_{\perp} = \vec{A}_{\perp} \quad (17) \quad \text{ou} \quad \vec{A}'_{\perp} = \vec{A}_{\perp} \quad (18)$$

Comme les champs \vec{E} et \vec{B} , \vec{A}_{\perp} est invariant de jauge

- Par contre, dans un changement de jauge, $\vec{A}_{||}$ et u changent puisque, d'après (16)

$$\vec{A}'_{||} = \vec{A}_{||} + i\vec{k}\Phi \quad u' = u - \dot{\Phi} \quad (19)$$

C'est cette possibilité de changer $\vec{A}_{||}$ et u sans changer les champs physiques \vec{E} et \vec{B} qui est à l'origine de la redondance de la description par les potentiels.

L'approche lagrangienne et hamiltonienne

① Lagrangien - Action

Système discret

- Coordonnées et vitesses généralisées: x_j, \dot{x}_j ($j=1,2,\dots,N$)
- Lagrangien: fonction des x_j et \dot{x}_j : $L(x_j, \dot{x}_j)$
- Action correspondant à un mouvement $x_j(t)$

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(x_j(t), \dot{x}_j(t)) dt \quad (20)$$

Système continu

- Coordonnées et vitesses généralisées: $A_j(\vec{r}), \dot{A}_j(\vec{r})$ ($j=1,2,\dots,N$)
- Lagrangien L et densité de lagrangien \mathcal{L}

$$L = \int d^3r \mathcal{L}(A_j, \dot{A}_j, \partial_i A_j) \quad (21) \quad \{\partial_i = \partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z\}$$

- Action correspondant à un mouvement $A_j(\vec{r}, t)$

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \mathcal{L}(A_j(\vec{r}, t), \dot{A}_j(\vec{r}, t), \partial_i A_j(\vec{r}, t)) \quad (22)$$

② Principe de moindre action

- Parmi tous les mouvements possibles partant d'un état initial donné (défini par $x_j(t_1)$ ou $A_j(\vec{r}, t_1)$) et aboutissant à un état final donné à t_2 (défini par $x_j(t_2)$ ou $A_j(\vec{r}, t_2)$), le mouvement effectivement suivi est celui qui rend l'action extrémale

- Traduction mathématique de ce principe: équations de Lagrange caractérisant le mouvement effectivement suivi

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} \right) = \frac{\partial L}{\partial x_j} \quad (23)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_j} - \sum_{i=x,y,z} \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i A_j)} \quad (24)$$

③ Lagrangiens équivalents

Système discret: Les 2 actions correspondant à 2 lagrangiens différant par une dérivée totale, L et $L' = L + df/dt$, diffèrent par une constante $f(t_2) - f(t_1)$, indépendante du chemin suivi, et ont donc même extrema. L et L' sont équivalents

Attention: f peut dépendre des x_j . $S' - S$ vaut alors $f(x_j(t_2), t_2) - f(x_j(t_1), t_1)$ qui ne dépend pas du chemin suivi car $x_j(t_2)$ et $x_j(t_1)$ sont fixés. Par contre, f ne peut pas

dépendre des vitesses \dot{x}_j car df/dt dépendrait alors des accélérations \ddot{x}_j et $L' = L + df/dt$ ne serait plus alors un lagrangien (qui ne doit dépendre que des x_j et \dot{x}_j).

Système continu L et $L' = L + \sum_{i=x,y,z} \partial_i f_i + \partial f_0 / \partial t$

sont équivalents si les f_i s'annulent à l'infini (transformation de $\int d^3r \partial_i f_i$ en une intégrale de surface). Là aussi, f_0 ne doit pas dépendre des \dot{A}_j .

④ Moments conjugués

Système discret $P_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j}$ (25)

Système continu $\Pi_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j}$ (26)

⑤ Hamiltonien

Système discret $H = \sum_j \dot{x}_j P_j - L$ (27)

Equations de Hamilton-Jacobi $\begin{cases} \dot{x}_j = \frac{\partial H}{\partial P_j} \\ \dot{P}_j = -\frac{\partial H}{\partial x_j} \end{cases}$ (28)

Système continu

$H = \int d^3r \sum_j \Pi_j(\vec{r}) \dot{A}_j(\vec{r}) - L = \int d^3r \mathcal{H}$ (29)

\mathcal{H} densité d'hamiltonien $\mathcal{H} = \sum_j \Pi_j(\vec{r}) \dot{A}_j(\vec{r}) - \mathcal{L}$ (30)

Equations de Hamilton - Jacobi

$\begin{cases} \dot{A}_j = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Pi_j} \\ \dot{\Pi}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial A_j} + \sum_{i=x,y,z} \partial_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_i A_j)} \end{cases}$ (31)

⑥ Quantification canonique

Système discret : x_m et P_n , composantes cartésiennes de la position \vec{x} et de l'impulsion \vec{p}

$[x_m, x_n] = [P_m, P_n] = 0$ $[x_m, P_n] = i\hbar \delta_{mn}$ (32)

Système continu : A_m et Π_n composantes cartésiennes de $\vec{A}(\vec{r})$ et $\vec{\Pi}(\vec{r})$, les 3 composantes du champ étant indépendantes

$\begin{cases} [A_m(\vec{r}), A_n(\vec{r}')] = [\Pi_m(\vec{r}), \Pi_n(\vec{r}')] = 0 \\ [A_m(\vec{r}), \Pi_n(\vec{r}')] = i\hbar \delta_{mn} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \end{cases}$ (33)

Remarque : Il est possible également dans certains cas de quantifier un champ avec des relations d'anticommutation entre champs et moments conjugués. Les équations de Heisenberg des champs quantiques $i\hbar \dot{\psi} = [\psi, H]$ doivent garder la même forme que les équations d'évolution des champs classiques.

① Comment sont-elles obtenues ?

A partir d'une formulation donnée, on peut

- changer de jauge
- changer de lagrangien en ajoutant une dérivée totale au lagrangien
- changer d'hamiltonien en effectuant directement sur l'hamiltonien une transformation unitaire.

Ces diverses transformations ne sont pas toujours nécessairement équivalentes.

Par exemple, certaines transformations de jauge se ramènent à des changements de lagrangien, mais il existe des changements de lagrangien qui ne sont pas équivalents à des changements de jauge et réciproquement.

De même, à tout changement de lagrangien est associé une transformation unitaire sur l'hamiltonien, mais il existe des transformations unitaires sur l'hamiltonien qui ne sont pas associées à des changements de lagrangien.

② Pourquoi rechercher des formulations équivalentes ?

- Essayer de trouver un nouveau point de vue où les calculs sont plus simples et plus directs, où les objets mathématiques de la théorie (vecteurs, opérateurs) ont un sens physique plus clair, où les phénomènes physiques que l'on désire étudier sont plus directement accessibles.
- Acquérir une compréhension plus profonde de l'électrodynamique quantique en l'abordant à partir de plusieurs points de vue différents.

Exemple 1 : Systèmes localisés de charges et transformations de Goppert-Mayer, Power, Zienau et Woolley.

- Apparition des moments multipolaires dans l'hamiltonien d'interaction.
- Convergence plus rapide de la sommation sur les états intermédiaires dans un processus du 2^{ème} ordre.
- Le moment conjugué du potentiel vecteur est l'induction électrique qui, à l'extérieur du système de charges coïncide avec le champ électrique total.

Exemple 2 : Transformation de Pauli-Fierz-Kramers

- Tentative de séparer du champ total le champ transverse lié aux particules.
- Dans le nouveau point de vue, les corrections radiatives apparaissent plus clairement, les opérateurs de champ décrivent le champ libre ou le champ effectivement rayonné par les particules, l'interaction entre particules.

et champs fait intervenir l'accélération des particules et non leur vitesse.

③ Les difficultés et les erreurs souvent commises.

Il ne faut pas oublier que dans 2 points de vue différents

- l'état du système n'est pas représenté par le même ket. Réciproquement, un même ket représente 2 états physiques différents suivant le point de vue utilisé.
- une grandeur physique n'est pas représentée par le même opérateur. Réciproquement, un même opérateur n'a pas le même sens physique dans un point de vue et dans l'autre.
- les calculs doivent être menés jusqu'au bout (par exemple, sommation sur tous les états intermédiaires, utilisation de fonctions d'ondes exactes et non approchées ...) pour retrouver l'équivalence des prédictions physiques.

Plan du cours

- Le Lagrangien standard de l'électrodynamique quantique
Les difficultés soulevées par la quantification
- Solutions possibles aux difficultés précédentes
 - 1 - Élimination des variables dynamiques redondantes et choix de la jauge de Coulomb
 - 2 - Changement de Lagrangien - Sélection des états physiques au moyen de la condition supplémentaire de Lorentz

Avantages et inconvénients de ces 2 solutions

Comment apparaît l'interaction de Coulomb dans ces 2 points de vue?

- Formulations équivalentes déduites de l'électrodynamique quantique non relativiste en jauge de Coulomb et adaptées à des systèmes de charges localisées
 - Comment obtenir des formulations équivalentes à partir de la formulation en jauge de Coulomb?
 - Densités de polarisation et de magnétisation. Induction électrique
 - Transformation de Goppert-Mayer pour un champ externe
 - Transformation de Power - Zienau - Woolley
 - Illustrations sur des processus à 1 ou 2 photons de l'équivalence entre les divers points de vue

Dans le cours 1987-88, seront discutées les formulations équivalentes déduites de la formulation en jauge de Coulomb visant à éliminer le champ transverse lié aux particules (Pauli-Fierz-Kramers) ainsi que les formulations équivalentes déduites de l'électrodynamique quantique relativiste en jauge de Lorentz