

2 Seconde quantification (non relativiste)

Dans ce chapitre, on veut répondre à la question suivante : pourquoi peut-on utiliser des champs pour décrire un ensemble de particules relativistes en interaction? On sait qu'en mécanique quantique relativiste, le nombre de particules n'est pas conservé par les interactions. On s'attend donc à devoir utiliser un formalisme permettant de décrire un nombre arbitraire de particules. Un tel formalisme existe déjà en mécanique quantique non relativiste, et nous verrons que l'objet central de cette description est un opérateur de champ.

2.1 Système de n particules identiques

Considérons tout d'abord un ensemble de n particules. L'espace de Hilbert est le produit tensoriel des espaces de Hilbert associés à chaque particule

$$\mathcal{H}^n = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_n. \quad (2.1)$$

Si les n particules sont identiques, les espaces \mathcal{H}_i constituent n copies du même espace de Hilbert \mathcal{H} . Les vecteurs de \mathcal{H}^n sont des combinaisons linéaires de produits tensoriels de vecteurs. On utilisera la notation

$$|\psi_1 \rangle \otimes |\psi_2 \rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n \rangle = |\psi_1 \psi_2 \cdots \psi_n \rangle. \quad (2.2)$$

On rappelle que le produit scalaire de deux vecteurs de ce type s'écrit

$$\langle \chi_1 \chi_2 \cdots \chi_n | \psi_1 \psi_2 \cdots \psi_n \rangle = \prod_{i=1}^n \langle \chi_i | \psi_i \rangle. \quad (2.3)$$

Les particules étant identiques, les valeurs moyennes des observables ne doivent pas dépendre de l'ordre que l'on a choisi pour les états.

2.1.1 Opérateurs de permutation

Considérons une permutation de n objets

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ P_1 & P_2 & \cdots & P_n \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

L'ensemble \mathcal{S}_n des permutations de n objets possède $n!$ éléments et forme un groupe sous la composition. On notera P^{-1} l'inverse de la permutation

P . Une transposition est une permutation qui échange deux indices et ne touche pas aux autres. Toute permutation se décompose en un produit de transpositions. On appelle signature de la permutation P la quantité $\epsilon(P) = (-1)^{N(P)}$, où $N(P)$ est le nombre de transpositions dans une décomposition de la permutation P . On définit alors un opérateur linéaire U_P dont l'action sur un état produit tensoriel s'écrit

$$U_P|\psi_1\psi_2\cdots\psi_n\rangle = |\psi_{P_1}\psi_{P_2}\cdots\psi_{P_n}\rangle. \quad (2.5)$$

L'action de U_P s'étend à tout vecteur de \mathcal{H}^n par linéarité. Si P et Q sont deux permutations de n objets, on vérifie les équations

$$U_Q U_P = U_{P \circ Q}, \quad U_P^{-1} = U_{P^{-1}}. \quad (2.6)$$

L'opérateur U_P ainsi défini est unitaire. Il suffit de le vérifier pour les éléments de matrice de U_P entre deux états produits tensoriels

$$\begin{aligned} \langle \chi_1\chi_2\cdots\chi_n | U_P | \psi_1\psi_2\cdots\psi_n \rangle &= \langle \chi_1\chi_2\cdots\chi_n | \psi_{P_1}\psi_{P_2}\cdots\psi_{P_n} \rangle \\ &= \prod_{i=1}^n \langle \chi_i | \psi_{P_i} \rangle = \prod_{i=1}^n \langle \chi_{P_i^{-1}} | \psi_i \rangle \\ &= \langle \chi_{P_1^{-1}}\chi_{P_2^{-1}}\cdots\chi_{P_n^{-1}} | \psi_1\psi_2\cdots\psi_n \rangle. \end{aligned} \quad (2.7)$$

On déduit de cette équation

$$\begin{aligned} \langle \psi_1\psi_2\cdots\psi_n | U_P^\dagger | \chi_1\chi_2\cdots\chi_n \rangle &= \overline{\langle \chi_1\chi_2\cdots\chi_n | U_P | \psi_1\psi_2\cdots\psi_n \rangle} \\ &= \langle \psi_1\psi_2\cdots\psi_n | \chi_{P_1^{-1}}\chi_{P_2^{-1}}\cdots\chi_{P_n^{-1}} \rangle = \langle \psi_1\psi_2\cdots\psi_n | U_{P^{-1}} | \chi_1\chi_2\cdots\chi_n \rangle, \end{aligned} \quad (2.8)$$

et donc

$$U_P^\dagger = U_{P^{-1}} = U_P^{-1}. \quad (2.9)$$

Si l'on utilise la représentation position, on associe à un vecteur $|\psi\rangle$ de \mathcal{H}^n la fonction d'onde

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n) = \langle \vec{x}_1\vec{x}_2\cdots\vec{x}_n | \psi \rangle. \quad (2.10)$$

La fonction d'onde associée au vecteur transformé par l'opérateur U_P s'écrit alors

$$\begin{aligned} \psi_P(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n) &= \langle \vec{x}_1\vec{x}_2\cdots\vec{x}_n | U_P | \psi \rangle \\ &= \langle \vec{x}_{P_1^{-1}}\vec{x}_{P_2^{-1}}\cdots\vec{x}_{P_n^{-1}} | \psi \rangle = \psi(\vec{x}_{P_1^{-1}}, \vec{x}_{P_2^{-1}}, \dots, \vec{x}_{P_n^{-1}}). \end{aligned} \quad (2.11)$$

L'action de l'opérateur U_P est de permuter l'ordre des états. Les éléments de matrice d'une observable O seront donc indépendants de l'ordre des états si, pour toute permutation P

$$\langle \phi | O | \psi \rangle = \langle \phi | U_P^\dagger O U_P | \psi \rangle = \langle \phi | U_P^{-1} O U_P | \psi \rangle, \quad (2.12)$$

c'est-à-dire

$$\forall P \in \mathcal{S}_n, \quad U_P^{-1} O U_P = O \Leftrightarrow O U_P - U_P O = [O, U_P] = 0. \quad (2.13)$$

On dit que les observables doivent être des invariants du groupe des permutations. Si l'on se restreint à des observables de ce type, les éléments de matrice ne dépendent pas de l'ordre des états. Considérons alors l'espace des états à deux particules \mathcal{H}^2 . Il y a dans ce cas une seule permutation autre que l'identité,

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad p^2 = \mathbf{1}. \quad (2.14)$$

À partir de tout état $|\psi\rangle \in \mathcal{H}^2$, on peut construire deux états propres de l'opérateur unitaire associé U_p

$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + U_p)|\psi\rangle, \quad |\psi_A\rangle = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - U_p)|\psi\rangle. \quad (2.15)$$

Il satisfont l'équation

$$U_p|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle, \quad U_p|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle. \quad (2.16)$$

$|\psi_S\rangle$ est un état symétrique, invariant par permutation, et $|\psi_A\rangle$ est un état antisymétrique, qui change de signe par transposition. Notons que ces états sont orthogonaux

$$\langle \psi_S | \psi_A \rangle = \langle \psi_S | U_P^\dagger U_P | \psi_A \rangle = - \langle \psi_S | \psi_A \rangle = 0, \quad (2.17)$$

et que si O est une observable, donc un opérateur invariant par permutation, alors

$$\langle \psi_S | O | \psi_A \rangle = \langle \psi_S | U_P^\dagger O U_P | \psi_A \rangle = - \langle \psi_S | O | \psi_A \rangle = 0. \quad (2.18)$$

Les éléments de matrice des observables sont donc toujours nuls entre un état symétrique et un état antisymétrique. En particulier, si O est le Hamiltonien, on en déduit qu'un état symétrique évolue en un état symétrique, et

un état antisymétrique en un état antisymétrique. On postule alors qu'un système de deux particules identiques est soit dans un état symétrique, soit dans un état antisymétrique. Dans le premier cas, on dit que la particule est un boson, et dans le second, que c'est un fermion. Plus généralement, on admettra que les états accessibles à un système de n particules identiques sont soit complètement symétriques, soit complètement antisymétriques. On va maintenant définir deux opérateurs qui sont des projecteurs sur les états complètement symétriques (antisymétriques).

2.1.2 Symétriseur et antisymétriseur

Les états à n particules complètement symétriques (antisymétriques) sont construits à partir des opérateurs

$$S_n = \frac{1}{n!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} U_P, \quad A_n = \frac{1}{n!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} \epsilon(P) U_P \quad (2.19)$$

Pour le symétriseur S_n comme pour l'antisymétriseur A_n , la somme porte sur toutes les permutations de n objets. On utilisera dans la suite une notation générique

$$\Lambda_n = \frac{1}{n!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} \lambda_P U_P, \quad \begin{cases} \lambda_P = 1 & \text{si } \Lambda_n = S_n \\ \lambda_P = \epsilon(P) & \text{si } \Lambda_n = A_n \end{cases} . \quad (2.20)$$

On va également utiliser deux propriétés valables pour n'importe quel groupe fini. Soit F une fonction sur le groupe des permutations \mathcal{S}_n , c'est-à-dire une application $P \rightarrow F(P)$ de \mathcal{S}_n dans \mathbb{R} , ou plus généralement dans un espace vectoriel. On a alors

$$\sum_{P \in \mathcal{S}_n} F(P) = \sum_{P \in \mathcal{S}_n} F(P^{-1}) \quad \text{et} \quad \forall Q \in \mathcal{S}_n, \quad \sum_{P \in \mathcal{S}_n} F(P) = \sum_{P \in \mathcal{S}_n} F(P \circ Q). \quad (2.21)$$

L'opérateur Λ_n vérifie les propriétés suivantes

- Λ_n est un opérateur hermitique,

$$\Lambda_n^\dagger = \frac{1}{n!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} \lambda_P U_P^{-1} = \frac{1}{n!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} \lambda_{P^{-1}} U_{P^{-1}} = \Lambda_n, \quad (2.22)$$

où on a utilisé le fait que la signature d'une permutation est égale à la signature de son inverse, $\epsilon(P^{-1}) = \epsilon(P)$, et la première des identités (2.21).

- On a la propriété importante

$$\forall P \in \mathcal{S}_n, \quad \Lambda_n U_P = U_P \Lambda_n = \lambda_P \Lambda_n, \quad (2.23)$$

qu'on démontre en utilisant $\epsilon(P \circ Q) = \epsilon(P)\epsilon(Q)$, et la seconde des identités (2.21).

- L'opérateur Λ_n est un projecteur

$$\Lambda_n^2 = \frac{1}{n!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} \lambda_P U_P \Lambda_n = \Lambda_n. \quad (2.24)$$

- Enfin, les opérateurs S_n et A_n projettent sur des sous-espaces orthogonaux

$$A_n S_n = \frac{1}{n!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} \lambda_P U_P S_n = \left(\frac{1}{n!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} \lambda_P \right) S_n = 0. \quad (2.25)$$

On va maintenant construire une base commode du sous-espace de l'espace de Hilbert \mathcal{H}^n formé des états complètement symétriques (antisymétriques).

2.1.3 Représentation nombre d'occupation

On considère une base orthonormée discrète $\{|u_1 \rangle, |u_2 \rangle, \dots\}$ de l'espace des états à une particule \mathcal{H} . On veut construire un état à n particules ayant n_1 particules dans l'état $|u_1 \rangle$, n_2 particules dans l'état $|u_2 \rangle$, etc., avec, bien sûr, $\sum_{i=1}^{+\infty} n_i = n$. On part alors de l'état

$$\underbrace{|u_1 \rangle |u_1 \rangle \dots |u_1 \rangle}_{n_1} \underbrace{|u_2 \rangle |u_2 \rangle \dots |u_2 \rangle}_{n_2} \dots = |\psi_{n_1 n_2 \dots} \rangle,$$

et on définit l'état nombre d'occupation $|n_1 n_2 \dots \rangle$ en appliquant à l'état précédent l'opérateur de symétrisation ou d'antisymétrisation Λ_n

$$|n_1 n_2 \dots \rangle = c_{n_1 n_2 \dots} \Lambda_n |\psi_{n_1 n_2 \dots} \rangle. \quad (2.26)$$

où le coefficient $c_{n_1 n_2 \dots}$ sera choisi de telle manière que l'état nombre d'occupation $|n_1 n_2 \dots \rangle$ soit normé,

$$\begin{aligned} \langle n_1 n_2 \dots | n_1 n_2 \dots \rangle &= 1 \\ &= |c_{n_1 n_2 \dots}|^2 \langle \psi_{n_1 n_2 \dots} | \Lambda_n | \psi_{n_1 n_2 \dots} \rangle \\ &= \frac{1}{n!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} \lambda_P |c_{n_1 n_2 \dots}|^2 \langle \psi_{n_1 n_2 \dots} | U_P | \psi_{n_1 n_2 \dots} \rangle. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Rappelons que la base $\{|u_1 \rangle, |u_2 \rangle, \dots\}$ est orthonormée. On en déduit que le produit scalaire $\langle \psi_{n_1 n_2 \dots} | U_P | \psi_{n_1 n_2 \dots} \rangle$ n'est non nul que si la permutation P ne mélange pas des états différents entre eux, par exemple n'échange pas un état $|u_1 \rangle$ avec un état $|u_2 \rangle$. Le nombre de permutations qui mélangent seulement les états $|u_1 \rangle$ entre eux, les états $|u_2 \rangle$ entre eux, etc., est $n_1! n_2! \dots$. Notons que dans le cas de fermions identiques, l'antisymétrisation complète restreint les nombres d'occupation aux valeurs 0 ou 1. Dans ce cas, la seule permutation qui intervient est l'identité. On obtient finalement le facteur de normalisation

$$c_{n_1 n_2 \dots} = \sqrt{\frac{n!}{\prod_{i=1}^{\infty} n_i!}}. \quad (2.28)$$

2.2 Particules identiques en nombre indéterminé

On va maintenant étudier le cas où le nombre de particules n'est pas fixé, comme cela arrive pour des particules relativistes en interaction. Pour cela, on va superposer les espaces \mathcal{H}^n , et définir des opérateurs qui font passer de \mathcal{H}^n à $\mathcal{H}^{n\pm 1}$.

2.2.1 Espace des états

Le nombre de particules est une observable, on lui associe un opérateur hermitien noté N . Les valeurs propres de N sont entières positives ou nulles. Les sous-espaces propres sont des espaces \mathcal{H}^n ,

$$|\psi \rangle \in \mathcal{H}^n \quad \Rightarrow \quad N|\psi \rangle = n|\psi \rangle. \quad (2.29)$$

On définit l'espace de tous les états comme la somme directe des espaces \mathcal{H}^n

$$\mathcal{H}^\infty = \mathcal{H}^0 \oplus \mathcal{H}^1 \oplus \dots = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}^n. \quad (2.30)$$

Le sous-espace \mathcal{H}^0 correspond à l'état qui ne contient aucune particule. Il est engendré par un vecteur unique, le vecteur vide $|0 \rangle$, qu'on supposera normé. La définition de \mathcal{H}^∞ , somme d'une infinité d'espaces de Hilbert, demande certaines précautions. On commence par considérer les vecteurs qui sont des combinaisons linéaires finies d'états à nombre de particules fixés

$$|\Psi \rangle = \sum_{n=1}^{n_{max}} |\psi_n \rangle, \quad |\psi_n \rangle \in \mathcal{H}^n \quad \text{et} \quad n_{max} \quad \text{fini}. \quad (2.31)$$

On obtient ainsi un espace vectoriel normé, mais qui n'est pas complet, c'est-à-dire qu'il y a des suites de Cauchy qui ne convergent pas vers un vecteur du type (2.31). À titre d'exemple, on peut considérer la suite $(|\Psi_P\rangle)_{P=0,1,\dots}$

$$|\Psi_P\rangle = \sum_{n=0}^P \frac{1}{2^{\frac{n}{2}}} |\psi_n\rangle, \quad |\psi_n\rangle \in \mathcal{H}^n \quad \text{et} \quad \langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1. \quad (2.32)$$

pour $P > Q$, $\|(|\Psi_P\rangle - |\Psi_Q\rangle)\|^2 = \sum_{n=Q+1}^P \left(\frac{1}{2}\right)^n = \left(\frac{1}{2}\right)^Q - \left(\frac{1}{2}\right)^P$.

Pour obtenir la totalité de \mathcal{H}^∞ , il faut ajouter aux vecteurs du type (2.31) toutes les limites des suites de Cauchy, par exemple $|\Psi_\infty\rangle = \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{2^n} |\psi_n\rangle$. Notons cependant que les vecteurs du type (2.31) sont denses dans \mathcal{H}^∞ .

Dans \mathcal{H}^∞ , les opérateurs de symétrisation S et d'antisymétrisation A sont sommes directes des opérateurs S_n et A_n dans chaque sous-espace \mathcal{H}^n . Ils laissent invariant le vecteur vide $|0\rangle$, dans lequel il n'y a rien à permuter. De manière générique,

$$\Lambda = \mathbf{1}_{\mathcal{H}^0} \oplus \Lambda_1 \oplus \Lambda_2 \oplus \dots \quad (2.33)$$

On appelle espace de Fock $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$ le sous-espace de \mathcal{H}^∞ invariant sous l'action de Λ . Les vecteurs de $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$ sont donc des combinaisons linéaires d'états à nombre de particules fixés complètement symétriques pour des bosons, et complètement antisymétriques pour des fermions. L'espace de Fock $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$ est l'espace des états d'un système de bosons (fermions) identiques en nombre indéterminé. Une base commode de $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$ est donnée par la représentation en nombre d'occupation

$$|n_1 n_2 \dots\rangle \quad \text{avec} \quad \sum_{i=1}^{+\infty} n_i < \infty. \quad (2.34)$$

La structure de cette base rappelle celle de l'espace des états d'un oscillateur harmonique à plusieurs degrés de liberté. On va préciser cette analogie en introduisant un opérateur de création et un opérateur d'annihilation associés à chaque état de la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots\}$ de l'espace des états à une particule \mathcal{H} .

2.2.2 Opérateurs de création et d'annihilation

On se limite dans ce paragraphe à un système de bosons identiques en nombre indéterminé. On introduit deux opérateurs a_i, a_i^\dagger associés à l'état

$|u_i\rangle$ de la base de \mathcal{H} . Leur action sur un état de la base nombre d'occupation de $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$ est définie par

$$\begin{aligned} a_i^\dagger |n_1 n_2 \cdots n_i \cdots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1 n_2 \cdots n_i + 1 \cdots\rangle, \\ a_i |n_1 n_2 \cdots n_i \cdots\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1 n_2 \cdots n_i - 1 \cdots\rangle. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Ainsi, l'opérateur a_i^\dagger **crée** (ajoute) une particule dans l'état $|u_i\rangle$. L'opérateur a_i **détruit** (supprime) une particule dans l'état $|u_i\rangle$. Ils envoient un vecteur complètement symétrique de \mathcal{H}_n dans un vecteur complètement symétrique de $\mathcal{H}_{n\pm 1}$. Comme ce sont des opérateurs linéaires, leur action sur tout vecteur de $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$ est déterminée par leur action sur les états de la base. Un calcul simple montre que l'opérateur $N_i = a_i^\dagger a_i$ compte le nombre de particules dans l'état $|u_i\rangle$

$$N_i |n_1 n_2 \cdots n_i \cdots\rangle = n_i |n_1 n_2 \cdots n_i \cdots\rangle. \quad (2.36)$$

L'opérateur nombre total de particules est donné par

$$N = \sum_i N_i = \sum_i a_i^\dagger a_i. \quad (2.37)$$

Vérifions que les opérateurs a_i^\dagger et a_i sont adjoints l'un de l'autre. On calcule l'élément de matrice

$$\begin{aligned} &\langle n'_1 n'_2 \cdots n'_i \cdots | a_i | n_1 n_2 \cdots n_i \cdots \rangle = \\ &= \sqrt{n_i} \langle n'_1 n'_2 \cdots n'_i \cdots | n_1 n_2 \cdots n_i - 1 \cdots \rangle \\ &= \sqrt{n_i} \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \cdots \delta_{n'_i n_i - 1} \cdots. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Pour que a_i^\dagger soit l'adjoint de a_i , l'élément de matrice que l'on vient de calculer doit être le complexe conjugué de l'élément de matrice

$$\begin{aligned} &\langle n_1 n_2 \cdots n_i \cdots | a_i^\dagger | n'_1 n'_2 \cdots n'_i \cdots \rangle = \\ &= \sqrt{n'_i + 1} \langle n_1 n_2 \cdots n_i \cdots | n'_1 n'_2 \cdots n'_i + 1 \cdots \rangle \\ &= \sqrt{n'_i + 1} \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \cdots \delta_{n_i n'_i + 1} \cdots. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Ces deux éléments de matrice sont réels et égaux, on vérifie donc que a_i^\dagger et a_i sont adjoints l'un de l'autre. On peut également établir les relations de commutation

$$[a_i, a_j] = 0, \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (2.40)$$

Dans la dernière de ces équations, on a sous-entendu dans le membre de droite l'opérateur identité de l'espace de Fock $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$. Ces relations de commutation sont caractéristiques d'une assemblée d'oscillateurs harmoniques. Pour calculer les relations de commutation de l'opérateur nombre de particules avec les créateurs et annihilateurs, on utilise l'identité suivante, où A , B et C sont trois opérateurs

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B. \quad (2.41)$$

On en déduit les relations

$$[N, a_i^\dagger] = \sum_j [a_j^\dagger a_j, a_i^\dagger] = \sum_j (a_j^\dagger [a_j, a_i^\dagger] + [a_j^\dagger, a_i^\dagger] a_j) = a_i^\dagger. \quad (2.42)$$

Cette relation de commutation avec l'opérateur nombre de particules N est caractéristique d'un opérateur qui augmente le nombre de particules d'une unité. Pour l'opérateur a_i , qui diminue le nombre de particules d'une unité, on obtient

$$[N, a_i] = -a_i. \quad (2.43)$$

Et pour un opérateur comme N_i qui ne change pas le nombre de particules, on obtient facilement $[N, N_i] = 0$.

On peut caractériser le vecteur vide $|0\rangle$ par le fait qu'il est le seul état de l'espace de Fock qui soit annihilé par tous les opérateurs a_i

$$\forall i, \quad a_i |0\rangle = 0. \quad (2.44)$$

Dans le second membre de cette équation apparaît le vecteur nul de l'espace de Fock, qui ne doit pas être confondu avec le vecteur vide.

Enfin, tous les vecteurs de la base nombre d'occupation peuvent être obtenus en faisant agir sur le vecteur vide un ensemble approprié d'opérateurs de création a_i^\dagger

$$|n_1 n_2 \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{\prod_{i=1}^{+\infty} n_i!}} (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle. \quad (2.45)$$

On va montrer qu'il existe une autre écriture, plus commode, pour l'action (2.35) des opérateurs de création et d'annihilation. Soit $|n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle$, $\sum_i n_i = n$, un état de la base nombre d'occupation. On calcule

$$S(|u_i\rangle |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle) = \sqrt{\frac{n!}{\prod_{i=1}^{+\infty} n_i!}} S_{n+1}(|u_i\rangle S_n |\psi_{n_1 n_2 \dots n_i \dots}\rangle). \quad (2.46)$$

L'opérateur S_{n+1} symétrise complètement les $n + 1$ états. L'ordre dans lequel on a mis ces états avant d'appliquer S_{n+1} est donc sans importance, et on peut oublier l'opérateur S_n . Une autre manière de présenter ce résultat consiste à remarquer qu'on doit calculer le produit $S_{n+1}(\mathbf{1}_{\mathcal{H}} \otimes S_n)$. L'opérateur $\mathbf{1}_{\mathcal{H}} \otimes S_n$ peut être vu comme une somme sur les permutations de $n + 1$ objets qui laissent le premier objet invariant

$$S_{n+1}(\mathbf{1}_{\mathcal{H}} \otimes S_n) = \frac{1}{n!} \sum_{P \in \mathcal{S}_{n+1}/P(1)=1} S_{n+1} U_P = S_{n+1}, \quad (2.47)$$

où on a utilisé l'équation (2.23). On obtient donc

$$\begin{aligned} S(|u_i \rangle |n_1 n_2 \cdots n_i \cdots \rangle) &= \sqrt{\frac{n!}{\prod_{i=1}^{+\infty} n_i!}} S_{n+1}(|u_i \rangle |\psi_{n_1 n_2 \cdots n_i \cdots} \rangle) \\ &= \sqrt{\frac{n!}{\prod_{i=1}^{+\infty} n_i!}} S_{n+1} |\psi_{n_1 n_2 \cdots n_i + 1 \cdots} \rangle = \sqrt{\frac{n_i + 1}{n + 1}} |n_1 n_2 \cdots n_i + 1 \cdots \rangle, \end{aligned} \quad (2.48)$$

où l'on a à nouveau utilisé le fait que l'ordre des états avant symétrisation est immatériel. Finalement, on déduit de l'équation (2.48)

$$a_i^\dagger |n_1 n_2 \cdots n_i \cdots \rangle = \sqrt{N} S(|u_i \rangle |n_1 n_2 \cdots n_i \cdots \rangle), \quad (2.49)$$

où \sqrt{N} est bien défini puisque toutes les valeurs propres de N sont positives ou nulles. On peut maintenant étendre la formule (2.49) à une combinaison linéaire des états de la base nombre d'occupation, c'est-à-dire à un état quelconque $|\Psi \rangle$ de l'espace de Fock

$$a_i^\dagger |\Psi \rangle = \sqrt{N} S(|u_i \rangle |\Psi \rangle). \quad (2.50)$$

On peut également considérer des combinaisons linéaires des états $|u_i \rangle$, et définir l'opérateur de création d'un état quelconque $|u \rangle \in \mathcal{H}$ à une particule par

$$a^\dagger(u) |\Psi \rangle = \sqrt{N} S(|u \rangle |\Psi \rangle). \quad (2.51)$$

Pour ce qui concerne l'opérateur d'annihilation, définissons un produit scalaire partiel qui est une application sesquilinéaire de $\mathcal{H} \times \mathcal{H}_n$ dans \mathcal{H}_{n-1} donnée par

$$\langle u | t_1 t_2 \cdots t_n \rangle = \langle u | t_1 \rangle |t_2 \cdots t_n \rangle. \quad (2.52)$$

C'est-à-dire qu'on fait le produit scalaire de l'état à une particule $|u \rangle$ avec le premier état du produit tensoriel de n états. On peut alors définir l'opérateur d'annihilation de l'état à une particule $|u \rangle$ par

$$a(u) |\Psi \rangle = \langle u | \sqrt{N} |\Psi \rangle. \quad (2.53)$$

Supposons que l'on considère un changement de base

$$\{|u_1 \rangle |u_2 \rangle \cdots \rangle\} \rightarrow \{|v_1 \rangle |v_2 \rangle \cdots \rangle\}. \quad (2.54)$$

On cherche la relation entre les opérateurs de création et d'annihilation $a^\dagger(u_i)$, $a(u_i)$ dans la première base avec les opérateurs $a^\dagger(v_i)$, $a(v_i)$ dans la deuxième base. On utilise pour cela la relation de complétude $\sum_i |u_i \rangle \langle u_i| = \mathbf{1}_{\mathcal{H}}$ et les expressions (2.51), (2.53)

$$\begin{aligned} a^\dagger(v_k)|\Psi \rangle &= \sqrt{N}S(|v_k \rangle |\Psi \rangle) \\ &= \sum_i \sqrt{N}S(|u_i \rangle \langle u_i|v_k \rangle |\Psi \rangle) = \sum_i a^\dagger(u_i) \langle u_i|v_k \rangle |\Psi \rangle \end{aligned} \quad (2.55)$$

$$\begin{aligned} a(v_k)|\Psi \rangle &= \langle v_k|\sqrt{N}|\Psi \rangle \\ &= \sum_i \langle v_k|u_i \rangle \langle u_i|\sqrt{N}|\Psi \rangle = \sum_i \langle v_k|u_i \rangle a(u_i)|\Psi \rangle \end{aligned} \quad (2.56)$$

On en déduit les relations

$$a^\dagger(v_k) = \sum_i a^\dagger(u_i) \langle u_i|v_k \rangle, \quad a(v_k) = \sum_i \langle v_k|u_i \rangle a(u_i). \quad (2.57)$$

On voit donc qu'un opérateur de création se transforme comme un ket, et un opérateur d'annihilation comme un bra.

2.2.3 Opérateur de champ

On définit les opérateurs

$$\psi^\dagger(\vec{x}) = \sum_i a^\dagger(u_i) \langle u_i|\vec{x} \rangle, \quad \psi(\vec{x}) = \sum_i \langle \vec{x}|u_i \rangle a(u_i), \quad (2.58)$$

appelés opérateurs de champ. Ils satisfont les relations de commutation

$$\begin{aligned} [\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})] &= \sum_{ij} \langle \vec{x}|u_i \rangle \langle u_j|\vec{y} \rangle [a_i, a_j^\dagger] = \langle \vec{x}|\vec{y} \rangle = \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) \\ \text{et } [\psi^\dagger(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})] &= 0, \quad [\psi(\vec{x}), \psi(\vec{y})] = 0. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Les opérateurs de champ représentent l'extension au cas d'une base continue des opérateurs de création et d'annihilation. L'opérateur $\psi^\dagger(\vec{x})$ crée une particule à la position \vec{x} , et l'opérateur $\psi(\vec{x})$ détruit une particule à cette même position. Contrairement aux opérateurs étudiés dans le paragraphe précédent, les opérateurs de champ créent et détruisent des états non normalisables. L'action des opérateurs de champ sur le vecteur vide s'écrit

$$\psi(\vec{x})|0 \rangle = 0, \quad \psi^\dagger(\vec{x})|0 \rangle = |\vec{x} \rangle \quad (2.60)$$

Pour obtenir un état à une particule normalisable, on doit former un paquet d'onde

$$|f\rangle = \int d^3x f(\vec{x})\psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle \quad (2.61)$$

La norme de cet état est donnée par

$$\begin{aligned} \langle f|f\rangle &= \int d^3x \int d^3y \bar{f}(\vec{x})f(\vec{y}) \langle 0|\psi(\vec{x})\psi^\dagger(\vec{y})|0\rangle = \\ &= \int d^3x \int d^3y \bar{f}(\vec{x})f(\vec{x}) \langle 0|[\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})]|0\rangle = \int d^3x |f(\vec{x})|^2. \end{aligned} \quad (2.62)$$

On peut écrire l'opérateur nombre de particules N en fonction des opérateurs de champ. On utilise la relation de complétude $\int d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| = \mathbf{1}_{\mathcal{H}}$ pour écrire

$$\begin{aligned} N &= \sum_i a^\dagger(u_i)a(u_i) = \sum_{ij} a^\dagger(u_i) \langle u_i|u_j\rangle a(u_j) \\ &= \int d^3x \sum_{ij} a^\dagger(u_i) \langle u_i|\vec{x}\rangle \langle \vec{x}|u_j\rangle a(u_j) = \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x}). \end{aligned} \quad (2.63)$$

L'opérateur $\psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x})$ peut donc être interprété comme opérateur densité de particules au point \vec{x} . On vérifie facilement les relations de commutation

$$[N, \psi^\dagger(\vec{x})] = \psi^\dagger(\vec{x}), \quad [N, \psi(\vec{x})] = -\psi(\vec{x}). \quad (2.64)$$

On peut répéter ce que l'on vient de faire dans l'espace des impulsions. Le passage de l'espace de configuration à l'espace des impulsions se fait par transformée de Fourier. On admettra que les opérateurs de champ possèdent une transformée de Fourier qui s'écrit

$$\psi(\vec{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} a(\vec{k})e^{i\vec{k}\vec{x}}, \quad \psi^\dagger(\vec{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} a^\dagger(\vec{k})e^{-i\vec{k}\vec{x}}, \quad (2.65)$$

et inversement

$$a(\vec{k}) = \int d^3x \psi(\vec{x})e^{-i\vec{k}\vec{x}}, \quad a^\dagger(\vec{k}) = \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x})e^{i\vec{k}\vec{x}} \quad (2.66)$$

Les opérateurs $a^\dagger(\vec{k})$ et $a(\vec{k})$ créent ou détruisent une particule d'impulsion \vec{k} . Leurs relations de commutation s'écrivent

$$[a(\vec{k}), a^\dagger(\vec{k}')] = (2\pi)^3 \delta^3(\vec{k} - \vec{k}'), \quad [a(\vec{k}), a(\vec{k}')] = 0, \quad [a^\dagger(\vec{k}), a^\dagger(\vec{k}')] = 0. \quad (2.67)$$

Enfin, l'opérateur nombre de particules s'écrit

$$N = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} a^\dagger(\vec{k})a(\vec{k}). \quad (2.68)$$

2.3 Fermions identiques

La construction des opérateurs de création et d'annihilation ainsi que des opérateurs de champ pour des fermions est très analogue à celle que nous venons d'effectuer pour des bosons. La seule difficulté supplémentaire est qu'il faut porter une grande attention aux signes.

2.3.1 Créateurs et annihilateurs

On définit les opérateurs de création et d'annihilation d'un état à une particule $|u\rangle$ par des formules tout à fait analogues à celles utilisées pour des bosons, (2.51) et (2.53),

$$a^\dagger(u)|\Psi\rangle = \sqrt{N}A(|u\rangle|\Psi\rangle), \quad a(u)|\Psi\rangle = \langle u|\sqrt{N}|\Psi\rangle. \quad (2.69)$$

Dans ces équations, $|\Psi\rangle$ est un état quelconque de l'espace de Fock complètement antisymétrisé \mathcal{H}_A^∞ . On va déduire de ces formules l'action sur un état de la base nombre d'occupation. Notons a_i^\dagger l'opérateur de création de l'état $|u_i\rangle$ de la base nombre d'occupation. Son action sur l'état à n particules

$$|n_1 \cdots n_i \cdots\rangle = \sqrt{n!}A_n(|\psi_{n_1 \cdots n_i \cdots}\rangle), \quad \sum_i n_i = n, \quad (2.70)$$

s'écrit

$$\begin{aligned} a_i^\dagger |n_1 \cdots n_i \cdots\rangle &= \sqrt{n+1}A_{n+1}(|u_i\rangle |n_1 \cdots n_i \cdots\rangle) \\ &= \sqrt{(n+1)!}A_{n+1}(|u_i\rangle |\psi_{n_1 \cdots n_i \cdots}\rangle). \end{aligned} \quad (2.71)$$

On rappelle que pour des fermions identiques, les nombres d'occupation n_j ne peuvent prendre que les valeurs 0 ou 1. En particulier, si $n_i = 1$, on doit dans la formule (2.71) antisymétriser sur un état produit tensoriel qui contient deux fois l'état $|u_i\rangle$, et on obtiendra donc le vecteur nul. On retrouve ainsi qu'on ne peut pas ajouter une particule dans un état déjà occupé. Enfin, pour exprimer l'état obtenu dans la formule (2.71) dans la base nombre d'occupation, on doit relier les états

$$|u_i\rangle |\psi_{n_1 \cdots n_i \cdots}\rangle \quad \text{et} \quad |\psi_{n_1 \cdots n_{i+1} \cdots}\rangle. \quad (2.72)$$

Ces deux états diffèrent seulement par l'ordre dans lequel sont disposés les états. Notons $s_i = \sum_{j=1}^{i-1} n_j$ le nombre d'états occupés avant l'état $|u_i\rangle$. On

considère la permutation de $n + 1$ objets

$$P = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & s & s+1 & s+2 & \cdots & n+1 \\ s+1 & 1 & \cdots & s & s+2 & \cdots & n+1 \end{pmatrix}. \quad (2.73)$$

P est une permutation circulaire sur les $s + 1$ premiers indices. On a alors la relation

$$|u_i\rangle |\psi_{n_1 \dots n_i \dots}\rangle = U_P |\psi_{n_1 \dots n_{i+1} \dots}\rangle. \quad (2.74)$$

La signature de la permutation P est $(-1)^s$. on a alors

$$\begin{aligned} a_i^\dagger |n_1 \dots n_i \dots\rangle &= \delta_{n_i 0} \sqrt{(n+1)!} A_n U_P |\psi_{n_1 \dots n_{i+1} \dots}\rangle \\ &= \delta_{n_i 0} (-1)^{s_i} |n_1 \dots n_i + 1 \dots\rangle \end{aligned} \quad (2.75)$$

On obtient également par des manipulations analogues

$$a_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle = \delta_{n_i 1} (-1)^{s_i} |n_1 \dots n_i - 1 \dots\rangle. \quad (2.76)$$

On veut maintenant comparer les produits d'opérateurs $a_i a_j^\dagger$ et $a_j^\dagger a_i$. On suppose par exemple $i > j$, et on calcule l'action de ces deux opérateurs sur un état de la base nombre d'occupation $|n_1 \dots n_j \dots n_i \dots\rangle$. On note $s_i = \sum_{k=1}^{i-1} n_k$, $s_j = \sum_{k=1}^{j-1} n_k \leq s_i$. On obtient

$$\begin{aligned} a_i a_j^\dagger |n_1 \dots n_j \dots n_i \dots\rangle &= \delta_{n_j 0} \delta_{n_i 1} (-1)^{s_i + s_j + 1} |n_1 \dots n_j + 1 \dots n_i - 1 \dots\rangle, \\ a_j^\dagger a_i |n_1 \dots n_j \dots n_i \dots\rangle &= \delta_{n_j 0} \delta_{n_i 1} (-1)^{s_i + s_j} |n_1 \dots n_j + 1 \dots n_i - 1 \dots\rangle. \end{aligned}$$

En comparant ces deux formules, on voit que le commutateur des opérateurs a_i et a_j^\dagger est un opérateur compliqué. En revanche, l'anticommutateur est simple

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = 0, \quad i > j. \quad (2.77)$$

On voit donc que les opérateurs de création et d'annihilation de fermions sont caractérisés par des relations d'anticommutation, et non de commutation. Un calcul complet conduit aux relations

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{a_i, a_j\} = 0, \quad \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0. \quad (2.78)$$

L'opérateur nombre de particules s'écrit, comme dans le cas des bosons, $N = \sum_i a_i^\dagger a_i$. Notons que cet opérateur est quadratique dans les opérateurs

de création et d'annihilation, et qu'on peut alors calculer ses relations de commutation avec les créateurs et annihilateurs en utilisant la relation

$$[AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B, \quad (2.79)$$

qui conduit à

$$[N, a_i] = \sum_j [a_j^\dagger a_j, a_i] = \sum_j (a_j^\dagger \{a_j, a_i\} - \{a_j^\dagger, a_i\} a_j). \quad (2.80)$$

Seul le second terme du membre de droite donne un résultat non nul. On obtient finalement

$$[N, a_i] = -a_i, \quad [N, a_i^\dagger] = a_i^\dagger. \quad (2.81)$$

Comme dans le cas des bosons, l'interprétation de ces résultats est que l'annihilateur a_i diminue le nombre de particules d'une unité, et que le créateur a_i^\dagger augmente le nombre de particules d'une unité. Enfin, on définit les opérateurs de champ par les mêmes formules que dans le cas des bosons

$$\psi(\vec{x}) = \sum_i \langle \vec{x} | u_i \rangle a_i, \quad \psi^\dagger(\vec{x}) = \sum_i a_i^\dagger \langle u_i | \vec{x} \rangle. \quad (2.82)$$

Ils satisfont les relations d'anticommutation

$$\{\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})\} = \delta(\vec{x} - \vec{y}), \quad \{\psi(\vec{x}), \psi(\vec{y})\} = 0, \quad \{\psi^\dagger(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})\} = 0. \quad (2.83)$$

2.4 Observables et évolution

Une fois construit l'espace de Fock $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$ dans lequel le nombre de particules n'est pas déterminé, il reste à construire les observables. Toute observable $F^{(n)}$ d'un système de n particules identiques est invariant sous le groupe des permutations

$$U_P^{-1} F^{(n)} U_P = F^{(n)} \Rightarrow F^{(n)} \Lambda_n = \Lambda_n F^{(n)}. \quad (2.84)$$

En conséquence, l'espace de Fock $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$ est stable sous l'action de $F^{(n)}$. Si un opérateur $F^{(n)}$ est défini pour chaque valeur de n , on obtiendra un opérateur F agissant dans l'espace de Fock par somme directe des $F^{(n)}$. L'opérateur ainsi obtenu commute avec l'opérateur nombre de particules.

2.4.1 Construction des observables

Considérons tout d'abord une observable $F^{(1)}$ à une particule. On peut toujours la décomposer sous la forme

$$F^{(1)} = \sum_{ij} F_{ij} |u_i\rangle\langle u_j|. \quad (2.85)$$

On va supposer que F est une grandeur additive. Par exemple, l'impulsion ou l'énergie cinétique d'une assemblée de particules est la somme des impulsions ou énergies cinétiques individuelles. On obtient alors l'opérateur agissant sur un état à n particules sous la forme

$$F^{(n)} = \sum_{a=1}^n F_a^{(1)}, \quad (2.86)$$

où $F_a^{(1)}$ est l'opérateur $F^{(1)}$ agissant sur le $a^{\text{ième}}$ espace du produit tensoriel, c'est-à-dire

$$F_a^{(1)} = \underbrace{\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}}_{a-1} \otimes F^{(1)} \otimes \underbrace{\mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}}_{n-a}.$$

L'action d'une permutation sur les opérateurs $F_a^{(1)}$ s'écrit

$$U_P^{-1} F_a^{(1)} U_P = F_{P(a)}^{(1)}. \quad (2.87)$$

On en déduit que l'opérateur $F^{(n)}$ est invariant par permutation

$$U_P^{-1} F^{(n)} U_P = \sum_{a=1}^n F_{P(a)}^{(1)} = \sum_{a=1}^n F_a^{(1)} = F^{(n)}. \quad (2.88)$$

Notons que l'opérateur $F^{(n)}$ peut s'écrire sous la forme

$$F^{(n)} = \frac{1}{(n-1)!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} U_P^{-1} F_1^{(1)} U_P. \quad (2.89)$$

On va utiliser cette expression pour exprimer l'action de $F^{(n)}$ à l'aide des opérateurs de création et d'annihilation. Soit $|\Phi\rangle$ un état à n particules de

l'espace de Fock $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$, donc complètement symétrique ou antisymétrique. On a alors

$$F^{(n)}|\Phi\rangle = F^{(n)}\Lambda_n|\Phi\rangle = \Lambda_n F^{(n)}|\Phi\rangle = \frac{1}{(n-1)!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} \Lambda_n U_P^{-1} F_1^{(1)} U_P |\Phi\rangle. \quad (2.90)$$

On utilise alors l'équation (2.23) et la symétrie (antisymétrie) complète de l'état $|\Phi\rangle$

$$\Lambda_n U_P^{-1} = \lambda_{P^{-1}} \Lambda_n, \quad U_P |\Phi\rangle = \lambda_P |\Phi\rangle. \quad (2.91)$$

On obtient alors

$$\begin{aligned} F^{(n)}|\Phi\rangle &= n \Lambda_n F_1^{(1)} |\Phi\rangle = \sum_{ij} n F_{ij} \Lambda_n |u_i\rangle \langle u_j | \Phi\rangle \\ &= \sum_{ij} n F_{ij} \Lambda_n |u_i\rangle \left(\frac{1}{\sqrt{n}} a_j | \Phi\rangle\right) = \sum_{ij} F_{ij} a_i^\dagger a_j | \Phi\rangle. \end{aligned} \quad (2.92)$$

Il n'y a plus dans la dernière expression aucune dépendance explicite dans le nombre de particules. Cette formule est donc valable dans tout l'espace de Fock $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$

$$F = \sum_{ij} F_{ij} a_i^\dagger a_j = \sum_{ij} a_i^\dagger \langle u_i | F^{(1)} | u_j \rangle a_j. \quad (2.93)$$

On montre facilement que dans une base continue, par exemple la représentation position, cette expression devient

$$F = \int d^3x \int d^3y \psi^\dagger(\vec{x}) \langle \vec{x} | F^{(1)} | \vec{y} \rangle \psi(\vec{y}). \quad (2.94)$$

Considérons quelques exemples simples. L'opérateur impulsion agit dans l'espace des états d'une particule par

$$\langle \vec{x} | \vec{P}^{(1)} | \psi \rangle = -i \vec{\nabla} \psi(\vec{x}) \Leftrightarrow \langle \vec{x} | \vec{P}^{(1)} | \vec{y} \rangle = -i \vec{\nabla} \delta^3(\vec{x} - \vec{y}). \quad (2.95)$$

On en déduit l'expression de l'opérateur impulsion dans l'espace de Fock

$$\vec{P} = -i \int d^3x \int d^3y \psi^\dagger(\vec{x}) \vec{\nabla} \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) \psi(\vec{y}) = -i \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x}) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}). \quad (2.96)$$

Par transformation de Fourier, on en déduit l'expression de cet opérateur dans la représentation impulsion

$$\vec{P} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \vec{k} a^\dagger(\vec{k}) a(\vec{k}). \quad (2.97)$$

On en déduit les relations de commutation

$$[P_i, a^\dagger(\vec{k})] = k_i a^\dagger(\vec{k}), \quad [P_i, a(\vec{k})] = -k_i a(\vec{k}). \quad (2.98)$$

L'interprétation de ces équations est que l'opérateur $a^\dagger(\vec{k})$ augmente l'impulsion de \vec{k} (créé une particule d'impulsion \vec{k}) et $a(\vec{k})$ diminue l'impulsion de \vec{k} (détruit une particule d'impulsion \vec{k}). Étudions maintenant l'opérateur énergie cinétique

$$T^{(1)} = \frac{\vec{P}^{(1)2}}{2m} \rightarrow \langle \vec{x} | T^{(1)} | \vec{y} \rangle = -\frac{1}{2m} \Delta \delta^3(\vec{x} - \vec{y}), \quad (2.99)$$

ce qui conduit à l'opérateur dans l'espace de Fock

$$T = -\frac{1}{2m} \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x}) \Delta \psi(\vec{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\vec{k}^2}{2m} a^\dagger(\vec{k}) a(\vec{k}). \quad (2.100)$$

Supposons maintenant que les particules sont soumises à l'action d'un potentiel extérieur $V(\vec{x})$. L'opérateur à une particule correspondant s'écrit

$$V^{(1)} = \int d^3x |\vec{x}\rangle V(\vec{x}) \langle \vec{x}|. \quad (2.101)$$

On en déduit l'opérateur dans l'espace de Fock

$$V = \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x}) V(\vec{x}) \psi(\vec{x}). \quad (2.102)$$

On est maintenant en mesure d'écrire la forme du Hamiltonien dans l'espace de Fock pour un système de particules identiques soumises à l'action d'un potentiel extérieur

$$H = \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x}) \left(-\frac{\Delta}{2m} + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}). \quad (2.103)$$

Supposons maintenant que les particules interagissent entre elles. Si l'on se limite à une interaction à deux corps, cela signifie que l'on se donne un opérateur non plus dans $\mathcal{H}^{(1)}$, mais dans $\mathcal{H}^{(2)}$

$$G^{(2)} = \sum_{ij,kl} g_{ij,kl} |u_i\rangle |u_j\rangle \langle u_k| \langle u_l|. \quad (2.104)$$

C'est un opérateur d'interaction entre deux particules identiques, il doit donc être invariant sous la permutation $p = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$

$$U_p^{-1}G^{(2)}U_p = G^{(2)} \Rightarrow g_{ij,kl} = g_{ji,lk}. \quad (2.105)$$

Il lui correspond dans l'espace des états de n particules $\mathcal{H}^{(n)}$ l'opérateur

$$G^{(n)} = \sum_{a < b} G_{ab}^{(2)}, \quad (2.106)$$

où $G_{ab}^{(2)}$ est l'opérateur $G^{(2)}$ agissant sur les $a^{\text{ième}}$ et $b^{\text{ième}}$ espaces du produit tensoriel, c'est-à-dire lorsque $a < b$

$$G_{ab}^{(2)} = \sum_{ijkl} g_{ij,kl} \underbrace{\mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}}_{a-1} \otimes |u_i\rangle \langle u_k| \otimes \underbrace{\mathbf{1} \cdots \mathbf{1}}_{b-a-1} \otimes |u_j\rangle \langle u_l| \otimes \underbrace{\mathbf{1} \cdots \mathbf{1}}_{n-b}.$$

Un opérateur de permutation $P \in \mathcal{S}_n$ agit sur $G_{ab}^{(2)}$ par

$$U_P^{-1}G_{ab}^{(2)}U_P = G_{P(a)P(b)}^{(2)}. \quad (2.107)$$

Du fait de l'invariance par permutation de l'opérateur $G^{(2)}$, on a $G_{ab}^{(2)} = G_{ba}^{(2)}$. On en déduit que l'opérateur dans l'espace des états de n particules s'écrit encore

$$G^{(n)} = \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} G_{ab}^{(2)}, \quad (2.108)$$

On vérifie alors que l'opérateur $G^{(n)}$ est invariant par permutation

$$U_p^{-1}G^{(n)}U_p = \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} G_{P(a)P(b)}^{(2)} = G^{(n)} \Rightarrow G^{(n)}\Lambda_n = \Lambda_n G^{(n)}. \quad (2.109)$$

L'opérateur $G^{(n)}$ peut encore s'écrire sous la forme

$$G^{(n)} = \frac{1}{2(n-2)!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} U_P^{-1}G_{12}^{(2)}U_P. \quad (2.110)$$

Soit $|\Phi\rangle$ un état à n particules de l'espace de Fock $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$, donc complètement symétrique ou antisymétrique. On a alors

$$G^{(n)}|\Phi\rangle = G^{(n)}\Lambda_n|\Phi\rangle = \Lambda_n G^{(n)}|\Phi\rangle = \frac{1}{2(n-2)!} \sum_{P \in \mathcal{S}_n} \Lambda_n U_P^{-1}G_1^{(2)}U_P|\Phi\rangle. \quad (2.111)$$

On utilise alors l'équation (2.23) et la symétrie (antisymétrie) complète de l'état $|\Phi\rangle$ pour écrire

$$\begin{aligned}
G^{(n)}|\Phi\rangle &= \frac{n(n-1)}{2}\Lambda_n G_{12}^{(2)}|\Phi\rangle \\
&= \sum_{ij,kl} \frac{n(n-1)}{2} (g_{ij,kl}\Lambda_n |u_i\rangle |u_j\rangle \langle u_k| \langle u_l|) |\Phi\rangle \\
&= \sum_{ij,kl} \frac{n(n-1)}{2} g_{ij,kl}\Lambda_n |u_i\rangle |u_j\rangle \left(\frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} a_l a_k |\Phi\rangle\right) \\
&= \sum_{ij,kl} \frac{\sqrt{n(n-1)}}{2} g_{ij,kl}\Lambda_n |u_i\rangle (\Lambda_{n-1} |u_j\rangle (a_k a_l |\Phi\rangle)) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{ij,kl} g_{ij,kl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k |\Phi\rangle. \tag{2.112}
\end{aligned}$$

Il n'y a plus dans la dernière expression aucune dépendance explicite dans le nombre de particules. Cette formule est donc valable dans tout l'espace de Fock $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$

$$G = \frac{1}{2} \sum_{ij,kl} g_{ij,kl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k. \tag{2.113}$$

Dans une base continue, par exemple la représentation position, cette expression devient

$$G = \frac{1}{2} \int d^3x d^3y d^3u d^3v \psi^\dagger(\vec{x}) \psi^\dagger(\vec{y}) \langle \vec{x} | \langle \vec{y} | G^{(2)} | \vec{u} \rangle | \vec{v} \rangle \psi(\vec{v}) \psi(\vec{u}). \tag{2.114}$$

Si on considère par exemple un potentiel d'interaction à deux corps

$$U^{(2)} = \int d^3x d^3y |\vec{x}\rangle |\vec{y}\rangle U(\vec{x}, \vec{y}) \langle \vec{x} | \langle \vec{y} |, \quad U(\vec{x}, \vec{y}) = U(\vec{y}, \vec{x}), \tag{2.115}$$

on en déduit l'opérateur dans l'espace de Fock

$$U = \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \psi^\dagger(\vec{x}) \psi^\dagger(\vec{y}) U(\vec{x}, \vec{y}) \psi(\vec{y}) \psi(\vec{x}). \tag{2.116}$$

On peut alors construire le hamiltonien pour un système de particule identiques soumis à un potentiel extérieur et en interaction par un potentiel à deux corps

$$H = T + V + U. \tag{2.117}$$

2.4.2 Équation de Schrödinger

Par construction, les différents termes du Hamiltonien (2.117) commutent avec l'opérateur nombre de particules

$$[N, T] = 0, \quad [N, V] = 0, \quad [N, U] = 0. \quad (2.118)$$

Considérons, en représentation de Schrödinger, un état de l'espace de Fock et sa décomposition en états à nombre de particules fixé

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_n |\Phi_n(t)\rangle, \quad N|\Phi_n(t)\rangle = n|\Phi_n(t)\rangle. \quad (2.119)$$

L'opérateur H agit indépendamment sur chacun des états $|\Phi_n(t)\rangle$ et se réduit dans chaque sous-espace $\mathcal{H}_\Lambda^{(n)}$ au Hamiltonien de n particules identiques soumises à un potentiel extérieur et à un potentiel d'interaction à deux corps. On peut alors écrire l'équation de Schrödinger dans l'espace de Fock $\mathcal{H}_\Lambda^\infty$ sous la forme

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = H |\Phi(t)\rangle. \quad (2.120)$$

où la constante de Planck \hbar a été prise égale à 1. Cette équation se réduit, pour chacun des vecteurs $|\Phi_n(t)\rangle$, de fonction d'onde

$$\Phi_n(t, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n) = \langle \vec{x}_1 \cdots \vec{x}_n | \Phi_n(t) \rangle, \quad (2.121)$$

à l'équation de Schrödinger usuelle

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_n(t, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n) = \left(\sum_k \left(-\frac{1}{2m} \Delta_k + V(\vec{x}_k) \right) + \sum_{k < l} U(\vec{x}_k, \vec{x}_l) \right) \Phi_n(t, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n). \quad (2.122)$$

L'équation de Schrödinger (2.120) pour le Hamiltonien (2.117) est donc équivalente à l'équation de Schrödinger usuelle pour un nombre fixé de particules. Cette équation peut également décrire l'évolution d'un système dont le nombre de particules n'est pas conservé si on introduit dans le Hamiltonien un terme qui ne commute pas avec l'opérateur nombre de particules. Un tel terme doit contenir un nombre d'opérateurs $\psi(\vec{x})$ différent du nombre de $\psi^\dagger(\vec{x})$.

2.4.3 Représentation de Heisenberg

Les calculs précédents ont été faits dans la représentation de Schrödinger, dans laquelle les états dépendent du temps, et les opérateurs $\psi(\vec{x})$, $\psi^\dagger(\vec{x})$ n'en dépendent pas. On va maintenant faire une transformation unitaire pour passer à la représentation de Heisenberg. On se limite à des modèles dont le Hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps. Si $|\Phi(t)\rangle$ est un état en représentation de Schrödinger, le même état en représentation de Heisenberg est donné par

$$|\Phi^H\rangle = e^{iHt}|\Phi(t)\rangle, \quad (2.123)$$

et, si Q est un opérateur en représentation de Schrödinger, le même opérateur en représentation de Heisenberg est donné par

$$Q^H(t) = e^{iHt}Qe^{-iHt}. \quad (2.124)$$

Les opérateurs dans la représentation de Heisenberg obéissent à l'équation d'évolution

$$i\frac{d}{dt}Q^H(t) = [Q^H(t), H]. \quad (2.125)$$

À partir des relations de commutation des opérateurs en représentation de Schrödinger, on obtient les relations de commutation à temps égaux dans la représentation de Heisenberg

$$[A^H(t), B^H(t)] = e^{iHt}[A, B]e^{-iHt}. \quad (2.126)$$

On notera l'opérateur de champ dans la représentation de Heisenberg par

$$\psi^H(t, \vec{x}) = e^{iHt}\psi(\vec{x})e^{-iHt}, \quad \psi^{H\dagger}(t, \vec{x}) = e^{iHt}\psi^\dagger(\vec{x})e^{-iHt}. \quad (2.127)$$

Ils satisfont, pour des bosons identiques, les relations de commutation à temps égaux déduites de (2.59)

$$\begin{aligned} [\psi^H(t, \vec{x}), \psi^{H\dagger}(t, \vec{y})] &= \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) \\ \text{et } [\psi^{H\dagger}(t, \vec{x}), \psi^{H\dagger}(t, \vec{y})] &= 0, \quad [\psi^H(t, \vec{x}), \psi^H(t, \vec{y})] = 0. \end{aligned} \quad (2.128)$$

On obtient les mêmes relations pour un système de fermions identiques en remplaçant simplement les commutateurs par des anticommutateurs. Les observables s'expriment par les mêmes formules qu'en représentation de Schrödinger. Par exemple l'opérateur impulsion défini en (2.96) s'écrit en représentation de Heisenberg

$$\vec{P}^H(t) = e^{iHt}\vec{P}e^{-iHt} = \int d^3x \psi^{H\dagger}(t, \vec{x})(-i\vec{\nabla})\psi^H(t, \vec{x}). \quad (2.129)$$

Pour étudier l'évolution des observables, on a besoin de l'évolution des opérateurs de champ $\psi^H(t, \vec{x})$. Limitons-nous à un système de particules identiques dans un potentiel extérieur. Le Hamiltonien (2.103) peut être exprimé en fonction des opérateurs de champ en représentation de Heisenberg

$$H = \int d^3x \psi^{H\dagger}(t, \vec{x}) \left(-\frac{\Delta}{2m} + V(\vec{x}) \right) \psi^H(t, \vec{x}). \quad (2.130)$$

L'équation de Heisenberg pour l'opérateur de champ s'écrit

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi^H(t, \vec{x}) = [\psi^H(t, \vec{x}), H], \quad (2.131)$$

que l'on calcule en utilisant les identités (2.59) ou (2.79) pour obtenir

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi^H(t, \vec{x}) = \left(-\frac{\Delta}{2m} + V(\vec{x}) \right) \psi^H(t, \vec{x}). \quad (2.132)$$

Cette équation est formellement identique à l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde d'une seule particule. Mais bien sûr, $\psi^H(t, \vec{x})$ n'est pas une fonction d'onde, mais un opérateur agissant dans l'espace de Fock. C'est à cause de cette similitude que l'on appelle seconde quantification la construction faite dans ce chapitre. Dans la première quantification, on remplace les variables de l'espace des phases \vec{x}, \vec{p} par des opérateurs d'un espace de Hilbert. Dans la seconde, on remplace la fonction d'onde par un opérateur agissant dans un espace de Fock. Il faut toutefois observer que la construction de l'espace de Fock et de l'opérateur de champ se situe strictement dans le cadre de la mécanique quantique ordinaire. La seconde quantification n'est qu'une méthode en mécanique quantique pour décrire un système de particules en nombre indéterminé. Le passage de la mécanique classique à la mécanique quantique représente un saut conceptuel important, il n'en est pas de même pour ce qui concerne la seconde quantification. L'appellation "seconde quantification" est consacrée par l'usage, mais ce n'est pas un très bon choix.

Considérons maintenant un système de particules identiques, qui interagissent par un potentiel à deux corps, en plus d'un potentiel extérieur. Le Hamiltonien est dans ce cas $H = T + V + U$, et s'exprime en fonction du champ dans la représentation de Heisenberg par les mêmes formules (2.100), (2.102) et (2.116) que dans la représentation de Heisenberg. On obtient dans

ce cas l'équation de Heisenberg

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi^H(t, \vec{x}) = \left(-\frac{\Delta}{2m} + V(\vec{x})\right) \psi^H(t, \vec{x}) + \int d^3y \psi^{H\dagger}(t, \vec{y}) U(\vec{x}, \vec{y}) \psi(t, \vec{y}) \psi(t, \vec{x}). \quad (2.133)$$

C'est une équation non linéaire, et même si l'on remplace les opérateurs de champ par des fonctions, elle ne peut pas être interprétée comme l'équation de Schrödinger d'une particule. On verra que la non-linéarité de l'équation de Heisenberg est caractéristique d'un système de particules en interaction les unes avec les autres.

2.4.4 Champs libres

Pour un système de particules libres, l'équation de Heisenberg devient

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2m}\right) \psi^H(t, \vec{x}) = 0, \quad (2.134)$$

et se résout facilement en transformée de Fourier

$$\psi^H(t, \vec{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} a(\vec{p}) e^{i\left(-\frac{\vec{p}^2}{2m}t + \vec{p}\vec{x}\right)}, \quad (2.135)$$

où $a(\vec{k})$ et son adjoint $a^\dagger(\vec{k})$ sont les opérateurs d'annihilation et de création en représentation impulsion. On connaît les relations de commutation à temps égaux de l'opérateur de champ, données par (2.128). On peut maintenant calculer les relations de commutations à temps quelconques en utilisant les relations (2.67)

$$\begin{aligned} [\psi^H(t, \vec{x}), \psi^{H\dagger}(t', \vec{x}')] &= \Delta(t - t', \vec{x} - \vec{x}'), \\ \Delta(t - t', \vec{x} - \vec{x}') &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{i\left(-\frac{\vec{p}^2}{2m}(t-t') + \vec{p}(\vec{x}-\vec{x}')\right)}. \end{aligned} \quad (2.136)$$

Notons que $\Delta(t - t', \vec{x} - \vec{x}')$ est une distribution, et pas une fonction. Elle est solution de l'équation de Schrödinger libre

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2m}\right) \Delta(t - t', \vec{x} - \vec{x}') = 0. \quad (2.137)$$

De plus, les équations de commutation à temps égaux impliquent qu'elle satisfait la condition initiale

$$\Delta(t - t' = 0, \vec{x} - \vec{x}') = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}'), \quad (2.138)$$

Elle permet donc, connaissant l'opérateur de champ à l'instant t' en tout point de l'espace, de calculer l'opérateur de champ à tout autre instant t en tout point de l'espace

$$\psi^H(t, \vec{x}) = \int d^3x' \Delta(t - t', \vec{x} - \vec{x}') \psi^H(t', \vec{x}'). \quad (2.139)$$

Exercice 2.A : On considère la distribution

$$G^{(2)}(t - t', \vec{x} - \vec{x}') = -i\theta(t - t')\Delta(t - t', \vec{x} - \vec{x}'). \quad (2.140)$$

On rappelle que la distribution $\theta(t)$ vaut 0 pour t négatif et 1 pour t positif, et qu'on a l'équation $\frac{d}{dt}\theta(t) = \delta(t)$. Montrer que la distribution $G^{(2)}$ est une fonction de Green pour l'opérateur qui apparaît dans l'équation de Schrödinger libre (2.134), c'est-à-dire qu'elle satisfait l'équation

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2m}\right)G^{(2)}(t - t', \vec{x} - \vec{x}') = \delta(t - t')\delta^3(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (2.141)$$

En utilisant la représentation suivante de la distribution $\theta(t)$

$$\theta(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} i \int \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-iEt}}{E + i\epsilon}, \quad (2.142)$$

montrer que la distribution $G^{(2)}$ peut être mise sous la forme

$$G^{(2)}(t - t', \vec{x} - \vec{x}') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int \frac{dE d^3p}{(2\pi)^4} \frac{e^{i(-E(t-t') + \vec{p}(\vec{x}-\vec{x}'))}}{E - \frac{\vec{p}^2}{2m} + i\epsilon}. \quad (2.143)$$

2.5 Formalisme Lagrangien

On a vu que l'opérateur de champ joue un rôle fondamental dans la description d'un système de particules identiques en nombre indéterminé. On se pose maintenant la question de savoir si l'on peut obtenir l'opérateur de champ $\psi(t, \vec{x})$, $\psi^\dagger(t, \vec{x})$, ses relations de commutation à temps égaux et son équation d'évolution par une procédure de **quantification** d'une théorie des champs classique. On entend par quantification la même procédure, dite quantification canonique, que dans le cas d'un nombre fini de degrés de liberté. On remplace les variables de l'espace de phase q_i , p^i et les crochets

de Poisson $\{q_i, p^j\} = \delta_i^j$ par des opérateurs hermitiques Q_i, P^i agissant dans un espace de Hilbert et satisfaisant les relations de commutation canoniques $[Q_i, P^j] = i\delta_i^j$. On se donne de plus une prescription permettant d'associer à toute fonction sur l'espace des phases, en particulier le Hamiltonien, un unique opérateur hermitique de l'espace de Hilbert

$$H(q, p) \rightarrow \mathcal{H}(Q, P). \quad (2.144)$$

Enfin, les équations de Hamilton sont remplacées par les équations de Heisenberg

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\}, \dot{p}^i = \{p^i, H\} \rightarrow \frac{dQ_i}{dt} = -i[Q_i, \mathcal{H}], \frac{dP^i}{dt} = -i[P^i, \mathcal{H}]. \quad (2.145)$$

Considérons le cas d'un système de bosons identiques dans un potentiel extérieur. On sait que l'équation de Heisenberg (2.131) a la même forme que l'équation de Schrödinger. On prend alors comme point de départ une théorie des champs classique dont l'équation du mouvement est l'équation de Schrödinger. On sait que l'on peut choisir l'action

$$S[\psi, \bar{\psi}] = \int d^4x \mathcal{L}(\psi, \bar{\psi}, \partial\psi, \partial\bar{\psi}), \\ \mathcal{L}(\psi, \bar{\psi}, \partial\psi, \partial\bar{\psi}) = (i\bar{\psi} \frac{\partial}{\partial t} \psi - \frac{1}{2m} \vec{\nabla} \bar{\psi} \vec{\nabla} \psi - V(\vec{x}) \bar{\psi} \psi). \quad (2.146)$$

Le moment conjugué du champ ψ s'écrit

$$\pi_t(\vec{x}) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \psi}{\partial t}} = i\bar{\psi}_t(\vec{x}). \quad (2.147)$$

On en déduit que $i\bar{\psi}_t(\vec{x})$ est la variable conjuguée du champ $\psi_t(\vec{x})$. Les coordonnées de l'espace des phases sont les fonctions $\psi_t(\vec{x})$ et $i\bar{\psi}_t(\vec{x})$ en tout point de l'espace à temps fixé. Les crochets de Poisson non nuls s'écrivent donc

$$\{\psi_t(\vec{x}), \bar{\psi}_t(\vec{y})\} = -i\delta^3(\vec{x} - \vec{y}). \quad (2.148)$$

On obtient alors le Hamiltonien

$$H[\psi_t, \bar{\psi}_t] = \int d^3x (i\bar{\psi}_t(\vec{x}) \frac{\partial}{\partial t} \psi_t(\vec{x}) - \mathcal{L}) \\ = \int d^3x (\frac{1}{2m} \vec{\nabla} \bar{\psi}_t \vec{\nabla} \psi + V(\vec{x}) \bar{\psi}_t \psi_t) = \int d^3x (\bar{\psi}_t (-\frac{\Delta}{2m} + V(\vec{x})) \psi_t), \quad (2.149)$$

où l'on a supposé que les fonctions $\psi_t(\vec{x})$ et $\bar{\psi}_t(\vec{x})$ décroissent suffisamment vite à l'infini. La quantification consiste à remplacer les variables de l'espace

des phases $\psi_t(\vec{x})$, $i\bar{\psi}_t(\vec{x})$ par des opérateurs en représentation de Heisenberg $\psi^H(t, \vec{x})$, $i\psi^{H\dagger}(t, \vec{x})$ et les crochets de Poisson par les relations de commutation à temps égaux

$$[\psi^H(t, \vec{x}), \psi^{H\dagger}(t, \vec{y})] = \delta^3(\vec{x} - \vec{y}). \quad (2.150)$$

Sans trop se poser de question sur l'ordre des opérateurs, on prendra pour l'opérateur Hamiltonien la même expression que dans le cas classique

$$H = \int d^3x (\bar{\psi}^{H\dagger}(t, \vec{x}) (-\frac{\Delta}{2m} + V(\vec{x})) \psi^H(t, \vec{x})). \quad (2.151)$$

Il reste à spécifier comment les opérateurs de champ agissent dans l'espace de Hilbert de la théorie. Cette étape est d'autant plus importante qu'en théorie des champs, contrairement au cas de la mécanique quantique avec un nombre fini de degrés de liberté, il existe plusieurs manières inéquivalentes de définir l'action des opérateurs de champ. En fait, on peut montrer que l'action des opérateurs de champ est déterminée lorsque l'on a choisi un vecteur vide. On supposera donc que l'espace de Hilbert de la théorie contient un vecteur normé $|0\rangle$ tel que, quel que soit le point \vec{x} considéré,

$$\psi^H(t, \vec{x})|0\rangle = 0, \quad (2.152)$$

où dans le second membre apparaît le vecteur nul de l'espace de Hilbert.

On voit qu'on a ainsi obtenu la théorie quantique d'un système de bosons en nombre indéterminé par quantification canonique d'une théorie des champs classiques. Dans le cas de particules relativistes, on va partir d'une théorie des champs classique invariante relativiste (par exemple, celle dont l'équation du mouvement est l'équation de Klein-Gordon), en effectuer la quantification canonique, et essayer d'interpréter l'espace de Hilbert de la théorie comme l'espace de Fock d'un système de particules identiques.

Exercice 2.B : En mécanique quantique, il existe un théorème important appelé théorème d'unicité de von Neumann qui est le suivant. Soit un système quantique caractérisé par les opérateurs hermitiques q^i , p_i , en nombre fini ($i = 1 \dots N$) satisfaisant les relations de commutation

$$[q^i, q^j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [q^i, p_j] = i\delta_j^i. \quad (2.153)$$

L'espace de Hilbert de la théorie s'identifie à l'espace des fonctions de carré sommable de N variables. Supposons qu'on ait un autre ensemble d'opéra-

teurs hermitiques Q^i , P_i agissant dans le même espace de Hilbert et satisfaisant les mêmes relations de commutation

$$[Q^i, Q^j] = 0, \quad [P_i, P_j] = 0, \quad [Q^i, P_j] = i\delta_j^i. \quad (2.154)$$

Alors, le théorème d'unicité de von Neumann nous dit qu'il existe une transformation unitaire U de l'espace de Hilbert qui relie ces deux ensembles d'opérateurs

$$Q^i = Uq^iU^{-1}, \quad P_i = Up_iU^{-1} \quad (2.155)$$

Malheureusement, ce théorème ne s'applique plus si l'on a un nombre infini de variables dynamiques, et donc en particulier ne s'applique pas à la théorie des champs, ce qui est la source d'ennuis considérables. On va étudier dans la suite un cas simple dans lequel le théorème d'unicité ne s'applique pas.

On considère tout d'abord un système comportant un nombre fini N de variables dynamiques q^i , p_i . On définit les opérateurs de création a_i et d'annihilation a_i^\dagger , $i = 1, \dots, N$, par

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_i - iq^i), \quad a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_i + iq^i). \quad (2.156)$$

Ils satisfont aux relations de commutation :

$$[a_i, a_j] = 0, \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (2.157)$$

On définit sur ce système la transformation linéaire :

$$a_i(\theta) = \text{ch}(\theta)a_i + \text{sh}(\theta)a_i^\dagger, \quad a_i^\dagger(\theta) = \text{sh}(\theta)a_i + \text{ch}(\theta)a_i^\dagger, \quad (2.158)$$

où θ est un paramètre réel.

1) Quelle est l'algèbre des opérateurs $a_i(\theta)$, $a_i^\dagger(\theta)$?

2) On définit la transformation :

$$U(\theta) = \exp\left(\frac{\theta}{2} \sum_{i=1}^N ((a_i)^2 - (a_i^\dagger)^2)\right). \quad (2.159)$$

Montrer que $U(\theta)$ est une transformation unitaire. On note :

$$b_i(\theta) = U(\theta)a_i(U(\theta))^{-1}, \quad b_i^\dagger(\theta) = U(\theta)a_i^\dagger(U(\theta))^{-1} \quad (2.160)$$

Montrer que les opérateurs $b_i(\theta)$, $b_i^\dagger(\theta)$ satisfont au système d'équations différentielles :

$$\frac{d}{d\theta} b_i(\theta) = b_i^\dagger(\theta), \quad \frac{d}{d\theta} b_i^\dagger(\theta) = b_i(\theta). \quad (2.161)$$

En intégrant ces équations, montrer que $U(\theta)$ réalise la transformation définie en (2.158) :

$$a_i(\theta) = U(\theta) a_i (U(\theta))^{-1}, \quad a_i^\dagger(\theta) = U(\theta) a_i^\dagger (U(\theta))^{-1} \quad (2.162)$$

3) On appelle vide des opérateurs a_i , a_i^\dagger l'état normé $|0\rangle$ de l'espace de Hilbert défini par les conditions :

$$a_i |0\rangle = 0, \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.163)$$

Montrer que le vecteur $|\theta\rangle = U(\theta)|0\rangle$ est le vide des opérateurs $a_i(\theta)$, $a_i^\dagger(\theta)$. On veut calculer l'amplitude $\langle 0|\theta\rangle$. Pour cela, montrer tout d'abord qu'elle satisfait aux équations :

$$\frac{d}{d\theta} \langle 0|\theta\rangle = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \langle 0|U(\theta)(a_i^\dagger)^2|0\rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \langle 0|(a_i)^2 U(\theta)|0\rangle \quad (2.164)$$

En utilisant ces équations, ainsi que les expressions (2.158), (2.162), montrer que l'amplitude $\langle 0|\theta\rangle$ satisfait à l'équation différentielle :

$$\frac{d}{d\theta} \langle 0|\theta\rangle = -\frac{N}{2} \frac{\text{sh}(\theta)}{\text{ch}(\theta)} \langle 0|\theta\rangle. \quad (2.165)$$

Intégrer cette équation, et donner la limite de l'amplitude $\langle 0|\theta\rangle$ lorsque le nombre N d'oscillateurs tend vers l'infini.

4) (lecture obligatoire, réponses aux questions facultatives) De manière générale, une base orthonormée de l'espace de Hilbert pour N oscillateurs est constituée par les états

$$|n_1 \cdots n_N \rangle = \frac{1}{\sqrt{\prod_{i=1}^N n_i!}} (a_1^\dagger)^{n_1} \cdots (a_N^\dagger)^{n_N} |0 \rangle, \quad \sum_{i=1}^N n_i = n. \quad (2.166)$$

On admettra que la limite N infini peut être définie de telle manière que les états (2.166), avec n fini, forment toujours une base de l'espace de Hilbert.

On se propose de calculer l'amplitude $\langle n_1 \cdots n_N | \theta \rangle$. On considère tout d'abord les opérateurs

$$S_i = e^{i\pi a_i^\dagger a_i}. \quad (2.167)$$

Montrer que chacun de ces opérateurs commute avec $U(\theta)$:

$$S_i U(\theta) = U(\theta) S_i. \quad (2.168)$$

En déduire que l'amplitude $\langle n_1 \cdots n_N | \theta \rangle$ s'annule si au moins un des nombres d'occupation n_i est impair. Démontrer ensuite la relation

$$\langle \psi | a_i | \theta \rangle = (-\text{th}(\theta)) \langle \psi | a_i^\dagger | \theta \rangle, \quad (2.169)$$

où $|\psi\rangle$ est un état quelconque de l'espace de Hilbert. On pourra utiliser cette relation pour montrer que si tous les nombres d'occupation sont pairs, $n_i = 2m_i$,

$$\langle n_1 \cdots n_N | \theta \rangle = \left(\prod_{i=1}^N \frac{\sqrt{n_i!}}{2^{m_i} m_i!} \right) \frac{(-\text{th}(\theta))^{\frac{n}{2}}}{(\text{ch}(\theta))^{\frac{N}{2}}}. \quad (2.170)$$

En déduire l'expression suivante du vide $|\theta\rangle$

$$|\theta\rangle = \frac{1}{(\text{ch}(\theta))^{\frac{N}{2}}} e^{-\frac{1}{2}\text{th}(\theta)\sum_{i=1}^N (a_i^\dagger)^2} |0\rangle \quad (2.171)$$

Montrer que si l'on fait tendre le nombre d'oscillateurs N vers l'infini en gardant le nombre d'occupation n fini, toutes les amplitudes $\langle n_1 \cdots n_i \cdots | \theta \rangle$ tendent vers 0. Dans la limite N infini, le ket $|\theta\rangle$ est donc orthogonal à tous les vecteurs de la base. Il n'est cependant pas nul, puisqu'on sait que c'est un vecteur normé. L'interprétation de ces résultats est que le vide $|\theta\rangle$ n'appartient pas à l'espace de Hilbert et que la transformation unitaire $U(\theta)$ n'existe pas dans la limite N infini. Dans cette limite, les opérateurs $a_i(\theta)$, $a_i^\dagger(\theta)$ ne sont pas reliés par une transformation unitaire aux opérateurs a_i , a_i^\dagger . Notons que l'action des opérateurs $a_i(\theta)$, $a_i^\dagger(\theta)$ est bien définie dans l'espace de Hilbert, même dans la limite N infini :

$$\begin{aligned} a_i^\dagger(\theta) |n_1 \cdots n_i \cdots\rangle &= (\text{ch}(\theta)) \sqrt{n_i + 1} |n_1 \cdots n_i + 1 \cdots\rangle \\ &+ (\text{sh}(\theta)) \sqrt{n_i} |n_1 \cdots n_i - 1 \cdots\rangle. \end{aligned}$$

Dans cette limite, on a dit que le vide $|\theta\rangle$ n'appartient pas à l'espace de Hilbert. Cet espace constitue donc une représentation de l'algèbre des opérateurs de création $a_i^\dagger(\theta)$ et d'annihilation $a_i(\theta)$ sans vecteur vide. La morale est que pour un nombre infini d'oscillateurs, il existe plusieurs espaces de représentation -plusieurs espaces de Hilbert- possibles, et il faudra donc faire un choix basé sur des considérations physiques.