Dragi Karevski

Physique quantique des champs et des transitions de phase

Master
Doctorat

Avec exercices corrigés

ellipses

1 Préambule quantique

1.1 Cadre mathématique de la théorie quantique

1.1.1 Espaces de Hilbert

Le cadre mathématique général de la mécanique quantique [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7] est celui de la théorie des espaces vectoriels complexes munis d'un produit scalaire, plus précisément des espaces de Hilbert. Un espace vectoriel est un ensemble d'objets, appelés vecteurs, qui est fermé sous l'addition (vectorielle) et la multiplication par les scalaires. Techniquement, un espace vectoriel est un système $\{V, K, +, .\}$ constitué de l'ensemble V des vecteurs, d'un corps K que l'on identifiera au corps des complexes $\mathbb{C}$, d'une loi de composition interne, notée $+$, associée à l'addition vectorielle et d'une loi de composition externe, notée ., appelée multiplication par un scalaire, tel que les axiomes suivants soient satisfaits :

- $\{V, +\}$ est un groupe commutatif, c'est-à-dire
  - $\forall u, v \in V, u + v \in V$
  - $u + (v + w) = (u + v) + w, \forall u, v, w \in V$: associativité
  - $\exists 0 \in V$, tel que $\forall u \in V$, $0 + u = u$: élément neutre ou vecteur nul
  - $\forall u \in V$, $\exists(-u) \in V$, tel que $(-u) + u = 0 = u + (-u)$: existence d'un inverse
- $\forall \alpha, \mu \in \mathbb{C}$ et $\forall u, v \in V$
  - $\alpha(u + v) = \alpha u + \alpha v$
  - $(\alpha + \mu)u = \alpha u + \mu u$
  - $\alpha(\mu u) = (\alpha\mu)u$
  - $1u = u$ où 1 est l'élément neutre du corps par rapport à la loi de multiplication.

De façon plus concise cela veut dire que la combinaison linéaire de deux vecteurs est encore un vecteur :

$$\forall u, v \in V \ , \quad \forall \alpha, \mu \in \mathbb{C} \ , \quad \alpha u + \mu v \in V \tag{1.1}$$

A cet espace vectoriel nous ajoutons un produit scalaire, qui est une opération externe de $V \times V \to \mathbb{C}$, telle que $\forall u, v, w \in V$ et $\forall \alpha, \mu \in \mathbb{C}$ on ait

— $(u, \alpha v + \mu w) = \alpha(u, v) + \mu(u, w)$: linéarité à droite
— $(u, v) = (v, u)^*$: antisymétrie, l'étoile dénotant la conjugaison complexe
— $(u, u) \geq 0$; $(u, u) = 0 \iff u = 0$: défini positif.

La propriété de linéarité à droite et l'antisymétrie implique l'antilinéarité à gauche

$$(\alpha u + \mu v, w) = \alpha^*(u, w) + \mu^*(v, w) \ . \tag{1.2}$$

Ces propriétés impliquent l'inégalité de Cauchy-Schwartz

$$|(u, v)| \leq \sqrt{(u, u)(v, v)} \ , \tag{1.3}$$

l'égalité n'étant satisfaite que si les deux vecteurs sont linéairement dépendants, c'est-à-dire si $u = \alpha v$. Le produit scalaire induit une norme naturelle

$$\|u\| = \sqrt{(u, u)} \ , \tag{1.4}$$

satisfaisant l'inégalité triangulaire $\|u + v\| \leq \|u\| + \|v\|$ déduite de l'inégalité de Cauchy–Schwartz [1] et permet donc de définir une distance entre deux éléments quelconques de V par

$$d(u, v) = \|u - v\| \tag{1.5}$$

ce qui fait de l'espace V un espace métrique ou espace pré-hilbertien.

Pour que l'espace soit hilbertien il faut en plus qu'il soit complet, c'est-à-dire qu'il faut que toute suite de Cauchy dans V converge en norme (avec la norme naturelle) vers un élément de V. Une suite de Cauchy est un ensemble d'éléments $\{u_i\}$ de V tel que

$$\lim_{n,m \to \infty} \|u_n - u_m\| = 0 \ .$$

La complétude de l'espace V signifie essentiellement que si une série infinie $\sum_{i=1}^{\infty} u_i$ d'éléments $u_i \in V$ converge absolument au sens de la norme, $\sum_{i=1}^{\infty} \|u_i\| < \infty$, alors elle converge vers un élément de V.

1. En utilisant la norme induite l'inégalité de Cauchy Schwartz s'écrit comme $|(u, v)| \leq \|u\| \|v\|$.

1.1.2 Dimension finie

En dimension finie il n'y a pas de problème : un espace pré-hilbertien complexe est complet, c'est un espace hermitien où tout se passe bien, la géométrie de celui-ci étant analogue aux espaces euclidiens. L'espace dual est isomorphe à l'espace de départ qui est isomorphe à $\mathbb{C}^n$ où n est la dimension de l'espace, l'orthogonal d'un sous-espace vectoriel est le supplémentaire de ce sous-espace, l'orthogonal de l'orthogonal d'un sous-espace redonne ce sous-espace et toutes les applications linéaires sont continues. Sur un espace hermitien V de dimension n on peut introduire une base, c'est-à-dire un ensemble de n vecteurs linéairement indépendants et tels que n'importe quel vecteur de l'espace puisse s'exprimer comme une combinaison linéaire de ceux-ci. Par procédé de Gram–Schmidt on peut toujours construire une base orthonormée $\{e_1, e_2, ..., e_n\}$ telle que

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij} \ , \forall \ i, j \tag{1.6}$$

et sur laquelle un vecteur quelconque ψ de l'espace admet une décomposition unique

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i e_i \ , \quad \alpha_i = (e_i, \psi) \tag{1.7}$$

où les α_i sont les composantes du vecteur ψ sur le vecteur de base e_i. L'espace étant isomorphe à $\mathbb{C}^n$, on peut représenter les vecteurs de V par des vecteurs colonnes composés de n nombres complexes dans une base orthonormée donnée. En effet, en associant à la base orthonormée $\{e_1, e_2, ..., e_n\}$ les vecteurs colonnes

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} , e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} , \dots \ , e_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \ ,$$

le vecteur $\psi \in V$ de décomposition $\psi = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i e_i$ est représenté par

$$\psi = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \ .$$

Le produit scalaire entre deux vecteurs $\psi = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i e_i$ et $\phi = \sum_{i=1}^{n} \beta_i e_i$ est donné par

$$(\psi, \phi) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^* \beta_i$$

ce qui induit pour la norme la relation de Pythagore

$$\|\psi\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |\alpha_i|^2} \ .$$

Une application linéaire A de V dans V (on parle d'opérateur linéaire ou encore d'endomorphisme), c'est-à-dire une transformation satisfaisant à

$$A(\alpha u + \mu v) = \alpha A(u) + \mu A(v) \ , \quad \forall \alpha, \mu \in \mathbb{C} \ , \quad \forall u, v \in V \ , \tag{1.8}$$

est complètement déterminée par son action sur les vecteurs de base. En effet, l'action de A sur un vecteur de base e_j est un vecteur qui se décompose donc de façon unique sur la base en

$$A(e_j) = \sum_{i=1}^{n} a_{ij} e_i \tag{1.9}$$

où les a_{ij} sont les coefficients de la décomposition linéaire associée au vecteur initial e_j. En choisissant la base orthonormée, ces coefficients sont donnés par la projection de $A(e_j)$ sur e_i :

$$a_{ij} = (e_i, A(e_j)) \ . \tag{1.10}$$

Pour une base orthonormée $\{e_i\}$ donnée, l'ensemble des n^2 scalaires a_{ij} donne la matrice associée à l'opérateur linéaire A, le premier indice indexant la ligne de la matrice et le deuxième indexant la colonne. Comme nous l'avons dit précédemment, les opérateurs linéaires en dimension finie sont nécessairement continus, c'est-à-dire qu'ils satisfont en tous points w de V (ici le vecteur w de V est vu comme un point de l'espace métrique V) la condition de continuité

$$\forall \epsilon > 0 \ , \exists \eta > 0 \text{ tq } \forall u \in V \ , d(u, w) < \eta \ \Rightarrow d(A(u), A(w)) < \epsilon \ . \tag{1.11}$$

En d'autres termes une application est continue en un point w si lorsqu'une suite $\{u_n\} \in V$ tend vers $w \in V$ la suite des images $\{A(u_n)\}$ tend vers $A(w)$. Cette condition de continuité pour les applications linéaires est équivalente à la condition

$$\operatorname*{Sup}_{\|u\|=1} \|A(u)\| < \infty \ . \tag{1.12}$$

En dimension finie les opérateurs bornés sont continus.

Démonstration. En effet, $\forall u = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i e_i \in V$ de norme $\|u\| = 1$ on a

$$\|A(u)\| = \|\sum_{i=1}^{n} \alpha_i A(e_i)\| \leq \sum_{i=1}^{n} |\alpha_i| \|A(e_i)\|$$

par inégalité triangulaire. Soit $M = \mathrm{Max}\{\|A(e_i)\|, i = 1, ..., n\}$ alors

$$\|A(u)\| \leq M \sum_{i=1}^{n} |\alpha_i| \leq nM\|u\|_\infty$$

où $\|u\|_\infty = \mathrm{Max}\{|\alpha_i|, i = 1, ..., n\}$ est la norme infinie. Mais puisque sur des espaces de dimension finie toutes les normes sont équivalentes, il existe $C > 0$ tel que $\|u\|_\infty \leq C\|u\|$ et donc

$$\frac{\|A(u)\|}{\|u\|} \leq C' < \infty$$

□

Associé à un opérateur linéaire A il existe toujours un adjoint unique, noté $A^\dagger$, tel que

$$(u, A(v)) = (A^\dagger(u), v) \quad \forall u, v \in V \tag{1.13}$$

qui est lui-même linéaire. On a coutume de ne pas noter les parenthèses pour l'action de l'opérateur sur un vecteur en assumant que l'action se fait à droite de l'opérateur. Ainsi $A(u)$ sera simplement écrit Au et par exemple la relation avec l'adjoint s'écrira $(A^\dagger u, v) = (u, Av)$. La matrice associée à l'adjoint $A^\dagger$ est la transposée complexe conjuguée de la matrice associée à A. En effet les coefficients scalaires, notés $(a^\dagger)_{ij}$, de $A^\dagger$ sont donnés par

$$(a^\dagger)_{ij} = (e_i, A^\dagger e_j) = (Ae_i, e_j) = (e_j, Ae_i)^* = a^*_{ji} \ . \tag{1.14}$$

L'addition de deux opérateurs linéaires, définie au sens de

$$(A + B)u \equiv Au + Bu \quad \forall u \in V \ , \tag{1.15}$$

et la multiplication par un scalaire,

$$(\lambda A)u \equiv \lambda Au = A(\lambda u) \quad \forall \lambda \in \mathbb{C} \ , \tag{1.16}$$

confère à l'ensemble des opérateurs linéaires de V dans V une structure d'espace vectoriel. Par ailleurs, cet espace vectoriel de dimension n^2 peut être muni d'une norme, par exemple la norme opératorielle $\|A\| \equiv \underset{\|u\|=1}{\mathrm{Sup}} \|A(u)\|$, ce qui en fait un espace vectoriel normé complet sur le corps des complexes, ce qu'on appelle un espace de Banach. Cet espace de Banach muni de l'adjonction †, qui est une involution, c'est-à-dire une opération bijective qui est son propre inverse, forme une algèbre stellaire (ou C^*-algèbre) telle que $\forall A, B$ opérateurs linéaires et $\forall \lambda \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned}
&(A+\lambda B)^\dagger = A^\dagger + \lambda^* B^\dagger \\
&(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \\
&(A^\dagger)^\dagger = A \\
&\|A\| = \|A^\dagger\|
\end{aligned}$$

où la norme d'opérateur est définie par

$$\|A\| \equiv \operatorname*{Sup}_{h\neq 0\in V}\left\{\frac{\|Ah\|}{\|h\|}\right\} = \operatorname*{Sup}_{h\in V, \|h\|=1}\{\|Ah\|\} = \operatorname*{Inf}_{h\in V}\{c>0 | \|Ah\| \leq c\|h\|\} \ . \tag{1.17}$$

Cette définition implique notamment $\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$. En effet, par définition de la norme d'opérateur on a pour tout vecteur $u \in V$ l'inégalité $\|Au\| \leq \|A\|\|u\|$ et donc $\|ABu\| \leq \|A\|\|Bu\| \leq \|A\|\|B\|\|u\|$ soit

$$\frac{\|ABu\|}{\|u\|} \leq \operatorname*{Sup}_{u\neq 0\in V}\left\{\frac{\|ABu\|}{\|u\|}\right\} \leq \|A\|\|B\| \ ,$$

ce qui prouve la sous multiplicativité de la norme d'opérateur $\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$. Pour montrer que la norme de l'adjoint est identique à la norme de l'opérateur considérons $\|A^\dagger u\|^2$. A partir de l'inégalité de Cauchy-Schwartz on déduit que la norme $\|A^\dagger u\|^2 = (A^\dagger u, A^\dagger u) = (u, AA^\dagger u) \leq \|u\|\|AA^\dagger u\|$ et avec $\|AA^\dagger u\| \leq \|u\|\|AA^\dagger\|$ on a $\|A^\dagger u\|^2 \leq \|u\|^2\|AA^\dagger\| \leq \|u\|^2\|A\|\|A^\dagger\|$ qui donne $\|A^\dagger\|^2 \leq \|A\|\|A^\dagger\|$ soit finalement $\|A^\dagger\| \leq \|A\|$. En répétant la même chose pour A on arrive à $\|A\| \leq \|A^\dagger\|$ ce qui montre que $\|A\| = \|A^\dagger\|$.

Dans le cas où $B = A^\dagger$ on a d'après la propriété de sous multiplicativité de la norme $\|AA^\dagger\| \leq \|A\|\|A^\dagger\| = \|A\|^2$ mais d'après ce qui précède on a aussi $\|A\|^2 \leq \|AA^\dagger\|$ soit finalement l'égalité des normes $\|A\| = \|A^\dagger\| = \sqrt{\|A^\dagger A\|} = \sqrt{\|AA^\dagger\|}$.

Cette structure algébrique munie de l'adjonction rappelle la structure algébrique sur les complexes liée à la conjugaison complexe. Cette analogie servira de guide dans bien des cas. Par exemple, les opérateurs satisfaisant à

$$A = A^\dagger \ ,$$

appelés hermitiens ou encore auto-adjoint (l'espace est supposé ici de dimension finie), jouent un rôle analogue à celui des nombres réels pour lesquels $z^* = z$. En particulier, leur spectre, c'est-à-dire l'ensemble de leur valeurs propres, est réel. De même, les opérateurs satisfaisant à

$$A^\dagger = A^{-1} \ ,$$

appelés unitaires, jouent un rôle analogue aux nombres de module unité $z = e^{i\theta}$. Ainsi, le spectre d'un opérateur unitaire est sur le cercle unité. De même que l'on peut toujours décomposer un nombre complexe en partie réelle et partie imaginaire, on peut toujours décomposer un opérateur linéaire A en une partie hermitienne et une partie anti-hermitienne

$$A = X + iY \ , \quad X = X^\dagger \ , Y = Y^\dagger$$

avec

$$X = \frac{A + A^\dagger}{2} \ , \quad Y = \frac{A - A^\dagger}{2i} \ .$$

1.1.3 Dimension infinie

Un espace pré-hilbertien de dimension infinie n'est pas nécessairement complet de sorte que les propriétés habituelles de la géométrie euclidienne (ou son extension hermitienne) ne sont plus nécessairement présentes : l'espace dual n'est plus isomorphe à l'espace de départ, l'orthogonal d'un sous-espace vectoriel n'est plus nécessairement le supplémentaire de ce sous-espace etc. Cependant, on peut toujours compléter un espace pré-hilbertien pour en faire un espace hilbertien.

Si $\mathfrak{H}$ est un espace de Hilbert de dimension infinie alors son dual noté $\mathfrak{H}^*$ peut être identifié à $\mathfrak{H}$ et en particulier $\mathfrak{H}^{**} = \mathfrak{H}$, tout comme pour les espaces de Hilbert de dimension finie.

Sur un espace de Hilbert $\mathfrak{H}$ il existe toujours une base hilbertienne. Cette notion généralise à la dimension infinie la notion de base orthonormée des espaces de dimension finie. Elle est définie comme un ensemble (pas nécessairement dénombrable) $\{e_i\} \in \mathfrak{H}$ de vecteurs de $\mathfrak{H}$ tel que

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij} \tag{1.18}$$

avec la propriété de complétude

$$\forall u \in \mathfrak{H} \ , \exists \{\lambda_i\} \quad \text{tq} \quad u = \sum_i \lambda_i e_i \tag{1.19}$$

où la série (infinie dans le cas des espaces de dimension infinie) converge vers u au sens de la norme naturelle (induite par le produit scalaire). Par ailleurs, les scalaires de la décomposition vectorielle ci-dessus sont uniques et sont donnés par

$$\lambda_i = (e_i, u) \ , \tag{1.20}$$

si bien que tout vecteur $u \in \mathfrak{H}$ peut s'écrire comme

$$u = \sum_i (e_i, u) e_i \ . \tag{1.21}$$

Si l'espace de Hilbert $\mathfrak{H}$ est séparable alors toutes les bases hilbertiennes consistent en un ensemble dénombrable de vecteurs. Un espace de Hilbert est séparable s'il contient une base hilbertienne dénombrable. Pour ce qui nous concerne nous ne travaillerons qu'avec des espaces de Hilbert séparables. Un espace de Hilbert séparable est isomorphe à l'espace de Hilbert $\ell^2(\mathbb{N})$, l'espace des vecteurs x à une infinité dénombrable de composantes $\{x_n\}$ muni du produit scalaire $(y, x) = \sum_{n \in \mathbb{N}} y_n^* x_n$. Autrement dit, on peut représenter un vecteur de ces espaces par un vecteur colonne à une infinité dénombrable de composantes.

Opérateurs bornés Sur les espaces de dimensions infinies il faut faire attention à ne pas transposer toutes les propriétés des espaces de Hilbert de dimensions finis. En particulier, il faut distinguer entre deux grandes classes d'opérateurs linéaires, à savoir les opérateurs bornés et les opérateurs non bornés [8]. Un opérateur T est dit borné si sa norme d'opérateur est finie, c'est-à-dire si $\forall \phi \in \mathfrak{H}$ il existe un nombre positif $c > 0$ tel que

$$\|T\phi\| \leq c\|\phi\|$$

et la plus petite valeur de ce nombre définie la norme de T. Pour un opérateur borné, son adjoint est borné également et leur action est définie sur l'espace de Hilbert tout entier. Le domaine d'un opérateur borné est l'espace de Hilbert tout entier :

$$\mathcal{D}(T) = \{\phi \in \mathfrak{H}\} \ . \tag{1.22}$$

Cela garantit que $\forall \phi, \psi \in \mathfrak{H}$ le produit scalaire $(\phi, T\psi)$ existe puisque,

$$|(\phi, T\psi)| \leq \|\phi\|\|T\psi\| \leq \|T\|\|\phi\|\|\psi\| < \infty \ , \tag{1.23}$$

et en particulier sur une base hilbertienne orthonormée $\{e_n\}$

$$(e_i, Te_j) \equiv T_{ij} \tag{1.24}$$

définit une matrice infinie représentant T dans la base considérée, comme pour le cas des espaces de Hilbert de dimensions finies.

Une isométrie S est un exemple d'opérateur borné puisque par définition

$$\|S\phi\| = \|\phi\| \quad \forall \phi \in \mathfrak{H} \ , \tag{1.25}$$