

Mon travail de recherche

Structure des atomes, Physique Quantique et équation de Schrödinger, mon sujet de prédilection était tout trouvé. Or il s'avère que ce domaine est loin d'être achevé. Un gros obstacle coince, le problème des corrections à l'équation de Schrödinger dues aux effets relativistes. Malgré beaucoup de travaux et de résultats, une approche globale manque toujours, alors que les applications, en chimie surtout, seraient immenses. Bref, un vaste champ de recherche ouvert s'étendait devant moi.

Les effets de la relativité sur les atomes sont loin d'être négligeables. S'il ne s'agit que de corrections sur les niveaux d'énergie de l'hydrogène, l'atome le plus léger, il n'en va pas de même pour les autres. En parcourant le tableau de Mendeleïev la charge du noyau augmente, et donc aussi l'énergie de liaison des électrons internes. Le traitement non relativiste n'est alors plus justifié et l'équation de Schrödinger donne des valeurs qui s'écartent de la réalité. L'effet le plus spectaculaire est observé sur l'atome d'or: selon l'équation de Schrödinger il devrait ressembler à l'argent. Or il est jaune et ne réagit presque pas. Le brillant des bijoux dorés et la résistance des dents en or à la salive sont des effets relativistes.

Le problème des atomes en Electrodynamique Quantique

L'Electrodynamique Quantique est une théorie physique déjà présentée dans ce site (sous "[Confrontation avec la Relativité](#)"). Cette théorie grandiose est sensée décrire tous les phénomènes électromagnétiques. Or les atomes sont de purs phénomènes électromagnétiques.

Nous avons vu que l'atome d'hydrogène peut être abordé dans cette théorie, avec des résultats excellents, mais à l'aide d'une approximation qui ne se généralise pas aux autres atomes.

On peut obtenir la structure des atomes en étudiant la diffusion. Par un phénomène voisin de l'effet tunnel, la répartition en énergie des états se retrouve dans les amplitudes de diffusion. On peut en déduire une méthode pour trouver les niveaux d'énergie, malheureusement trop indirecte et difficile à mettre en œuvre. Elle n'a pas encore conduit à une théorie simple pour les atomes, permettant de faire des calculs.

L'une des difficultés de cette approche est que chaque électron vit dans son propre espace-temps. Que chaque particule ait ses propres variables de position est naturel, et cela a toujours été utilisé en physique, mais que faire de tous ces temps? Et on ne peut pas les remplacer par un temps unique, celui de notre montre, sans perdre l'invariance de Lorentz!

La Théorie des Champs Quantiques et Relativistes

Ça, c'est le nom qui regroupe toutes les théories quantiques et relativistes décrivant un nombre quelconque de particules, de tous types. L'Electrodynamique Quantique en est un exemple. Elle contient aussi des théories avec différentes interactions, et d'autres où on suppose que l'espace n'a pas 3 dimensions.

Dans toutes ces théories (sauf dans quelques cas très particuliers) l'introduction d'une interaction est délicate, et pour effectuer des calculs on doit utiliser des développements en approximations

successives. Tous les développements ainsi obtenus ont en commun les deux grosses difficultés de l'Electrodynamique Quantique, à savoir des termes impossibles à calculer, nécessitant une Renormalisation, et un mauvais conditionnement des séries, les termes divergeant à partir d'un certain ordre.

Ces difficultés sont moins aigües lorsqu'on diminue le nombre de dimensions de l'espace (c'est la raison pour laquelle on s'y intéresse). Ainsi en 1973, J. Glimm, A. Jaffe et T. Spencer ont réussi à établir mathématiquement un exemple de théorie des champs quantiques et relativistes à une dimension d'espace, avec interaction. La physique quantique et la relativité ne sont donc pas logiquement incompatibles! Cependant cette construction est si complexe qu'elle ne permet pas d'obtenir d'autres méthodes de calcul, on doit encore utiliser les développements en approximations successives, mais avec une grande différence cette fois: en s'arrêtant à un certain ordre on peut estimer l'imprécision commise, grâce à la construction mathématique de la théorie.

Notons que le résultat de Glimm, Jaffe et Spencer a fait naître un immense espoir dans la communauté des physiciens et des mathématiciens. Cet espoir s'est depuis un peu refroidi, parce qu'on a jamais réussi à appliquer leur méthode à une théorie avec 3 dimensions d'espace. Décidément, l'obstacle est tenace!

Le problème des états liés en Théorie des Champs Quantiques et Relativistes

Le terme **état lié** remplace celui d'atome dans une théorie décrivant d'autres types de particules que des protons, électrons et photons.

Dans le cadre de la théorie de Glimm, Jaffe et Spencer j'ai reposé le problème des états liés. Je suis parti d'un résultat de Paul Perraux, obtenu en exploitant avec bonheur une suggestion de Glimm et Jaffe. Abandonnant la méthode basée sur les amplitudes de diffusion et ses temps multiples, on retourne à la case de départ.

En Mécanique Quantique on obtient la structure et la forme des atomes grâce à l'équation de Schrödinger. Cette équation se déduit en cherchant des états (des fonctions) dont la dépendance temporelle est particulière et donnée d'avance. Or en théorie des champs on travaille avec les amplitudes de diffusion et non pas avec les états puisque leur contenu en particules est ambigu (voir l'Electrodynamique Quantique dans "Confrontation avec la Relativité").

Il y a cependant des exceptions. L'état du vide par exemple décrit bien l'absence de particules. Les états à une particule sont aussi clairement définis, puisqu'ils sont en fait des états libres. J'ai donc commencé par décrire ces états à un instant fixé ^[1].

Pour obtenir un état lié j'ai considéré toutes les combinaisons de deux états à une particules, prises au même temps. Puis j'ai cherché dans ce vaste ensemble les éléments de plus basse énergie, qui puissent correspondre à un état lié (le critère pour cela est de trouver un état d'énergie inférieure à l'énergie de repos). La recherche de ce minimum donne un condition sous forme d'une équation, qu'on peut développer en approximations successives. Au premier ordre cette équation donne... l'équation de Schrödinger! Et aux ordres suivants on obtient ses corrections relativistes, telles que le prévoit cette théorie ^[2].

Remarquons qu'on a pu prendre des temps fixes égaux parce qu'on travaille sur des états, qui ne sont pas des grandeurs invariantes sous les changements de référentiel (de même que les états de la pipe du capitaine dans le bateau de Galilée!).

Finalement ce travail s'est laissé agréablement généraliser et a conduit à une théorie simple, décrivant deux particules quantiques et relativistes en interaction, dégagée de toute référence à la théorie des champs [3].

Retour à l'Electrodynamique Quantique

Il faut revenir sur terre. L'espace dans lequel nous vivons n'a pas une dimension, mais trois.

Dans les années 60, Julian Schwinger a étudié l'Electrodynamique Quantique à une dimension d'espace. Il a obtenu des résultats stupéfiants: cette théorie se laisse résoudre complètement, et décrit un univers curieux, dans lequel les photons et les électrons se découplent et les photons acquièrent une masse. Bref, un univers sans rapport avec le nôtre.

En fait, c'est encore à cause de la relativité que le nombre de dimension de l'espace joue un rôle si important. Dans un espace à une dimension, constitué d'une droite seulement, la notion de "rotation" n'existe pas. La roue, l'une des plus grandes inventions de l'humanité, n'y a aucun sens. Or dans un espace à deux ou plus dimensions, une transformation de Lorentz produit des rotations. En effet, on a vu qu'en s'approchant de la vitesse de la lumière les longueurs, dans la direction de la vitesse, diminuent. Or en contractant une direction de l'espace, les points hors de cette direction subissent automatiquement une rotation.

C'est ce fait capital que les théories à une dimension d'espace négligent, et qui les rend si différentes de notre réalité.

La généralisation à l'espace à trois dimensions de la simple théorie que j'avais trouvée est possible, mais avec d'importantes restrictions [4]: cela fonctionne que pour deux particules et qui n'interagissent que si elles ne sont pas en rotation, sinon elles sont libres. Manifestement les forces dans la nature ne sont pas de ce type.

Aussi j'ai rouvert mes cahiers d'Electrodynamique Quantique pour reprendre tout mon travail dans ce cadre. J'étais plongé dans cette tâche exaltante lorsque j'ai dû changer d'orientation.

Références

- [1] Etienne Frochoux, Zero-time one-particle states in quantum field theory, dans *Communications in Mathematical Physics*, Vol 136, 1991 (cet article peut être obtenu intégralement sur Internet)
- [2] Etienne Frochoux, The bound states of relativistic quantum field models [...], dans *Nuclear Physics B*, Vol 389, 1993
- [3] Etienne Frochoux, A relativistic quantum equation for $N > 1$ bosons in two space-time dimensions, dans *Helvetica Physica Acta*, Vol 68, 1995
- [4] Etienne Frochoux, New representations of the Poincaré group for two bosons, dans *Annales de l'Institut Henri Poincaré A*, Vol 71 no 2, 1999