République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Echahid Cheikh Larbi Tébessi - Tébessa
Faculté des Sciences Exactes et Sciences de la Nature et de la Vie
Département : Sciences de la Matière

N° d'ordre : _____
Série : _____

Mémoire

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de
Master
Domaine : ***Physique***

Option : ***Physique de la matiére condensée***

Thème

L'oscillateur de Feshbach-Villars FV-0 pour une particule bosonique unidimensionnelle

Par :
Zerfaoui Soundes *Nedjma Mouhammdi*

Devant le jury

Pr. Chaouche Yassine *Université Echahid Cheikh Larbi Tébessi - Tébessa*	**Président**
Pr. Abdelmalek Boumali *Université Echahid Cheikh Larbi Tébessi - Tébessa*	**Rapporteur**
Dr. Messai Nadjette *Université Echahid Cheikh Larbi Tébessi - Tébessa*	**Examinateur**

Date de soutenance : 10 Juin 2025

© *Mémoire effectué au*
Laboratoire de Physique Appliquée et Théorique



L'oscillateur de Feshbach-Villars FV-0 pour une particule bosonique unidimensionnel

Zerfaoui Soundes, Nedjma Mouhammdi

24 juin 2025

ملخص

تتناول هذه الأطروحة دراسة الديناميكا الكمومية النسبية لجسيم بوزوني أحادي البعد ذو سبين معدوم، وذلك باستخدام الصياغة النسبية من نوع فشباخ-فيلارز ،(FV-٠) وهي إعادة صياغة من الدرجة الأولى وبمركبتين لمعادلة كلاين-غوردون. يهدف هذا العمل إلى معالجة الإشكالات التفسيرية في إطار معادلة كلاين-غوردون التقليدية، خاصةً مسألة عدم إيجابية الكثافة الاحتمالية، من خلال الاستفادة من منهجية FV-٠ التي تتيح الفصل الواضح بين حلول الطاقة الموجبة والسالبة وتوفر تفسيرًا احتماليًا متسقًا. تنقسم الأطروحة إلى ثلاثة أجزاء رئيسية. أولاً، تقدم التمثيل الهاميلتوني لمعادلة كلاين-غوردون وتفصل في شرح منهجية فشباخ-فيلارز للجسيمات ذات السبين الصفري، سواء في حالة التفاعل أو بدونه. بعد ذلك، يتم تطبيق منهجية FV-٠ على مذبذب هارموني كمومي نسبي وعلى ذرة البيون، حيث يتم اشتقاق الأطياف الطاقية والدوال الموجية الموافقة. تظهر التحاليل أن منهجية FV-٠ تعطي نتائج متوافقة مع نظرية كلاين-غوردون التقليدية، لكنها تقدم تفسيرًا أكثر قوة لكثافة الاحتمال والتيار. أخيرًا، تقدم الأطروحة وتُقارن منهجية بديلة من نوع شرودنجر للجسيمات النسبية ذات السبين الصفري، وتبرز فعاليتها لبعض المشاكل مع الإشارة إلى حدودها فيما يتعلق بالمعالجة الصريحة لحالات الجسيم المضاد. من خلال الحلول التحليلية والتحليل المقارن، تؤكد هذه الدراسة أن منهجية FV-٠ تمثل إطارًا قويًا وذا معنى فيزيائي لوصف الأنظمة الكمومية النسبية للبوزونات ذات السبين الصفري. وتوفر النتائج رؤى جديدة حول بنية المعادلات الموجية النسبية وتفتح آفاقًا لأبحاث مستقبلية حول أنظمة أكثر تعقيدًا وتطبيقات محتملة في فيزياء الطاقات العالية والمعلومات الكمومية.

Abstract

This memory investigates the relativistic quantum dynamics of a one-dimensional spin-0 bosonic particle using the Feshbach-Villars (FV-0) formalism, a first-order two-component reformulation of the Klein-Gordon equation. The work aims to address the interpretational challenges of the standard Klein-Gordon framework—particularly the issue of non-positive-definite probability density—by leveraging the FV-0 approach, which enables a clear separation of positive and negative energy solutions and provides a consistent probabilistic interpretation.

The memory is structured in three main parts. First, it presents the Hamiltonian representation of the Klein-Gordon equation and details the Feshbach-Villars formalism for spin-0 particles, both with and without interactions. Next, it applies the FV-0 formalism to the relativistic quantum harmonic oscillator and the pion atom, deriving the corresponding energy spectra and wave functions. The analysis demonstrates that the FV-0 formalism yields results consistent with the standard Klein-Gordon theory but offers a more robust interpretation of probability density and current. Finally, the thesis introduces and compares an alternative, Schrödinger-type approach for relativistic spin-0 particles, showing its effectiveness for certain problems while highlighting its limitations regarding the explicit treatment of antiparticle states.

Through analytical solutions and comparative analysis, this work confirms the FV-0 formalism as a powerful and physically meaningful framework for describing relativistic quantum systems of spin-0 bosons. The results provide new insights into the structure of relativistic wave equations and open perspectives for further research on more complex systems and potential applications in high-energy and quantum information physics.

Résumé

Ce mémoire étudie la dynamique quantique relativiste d'une particule bosonique de spin zéro en une dimension à l'aide du formalisme de Feshbach-Villars (FV-0), une reformulation à deux composantes et du premier ordre de l'équation de Klein-Gordon. Ce travail vise à résoudre les difficultés d'interprétation du cadre standard de Klein-Gordon, notamment la question de la densité de probabilité non définie positive, en exploitant l'approche FV-0 qui permet une séparation claire des solutions à énergie positive et négative et offre une interprétation probabiliste cohérente.

Le mémoire est structuré en trois parties principales. D'abord la représentation hamiltonienne de l'équation de Klein-Gordon et détaille le formalisme de Feshbach-Villars pour les particules de spin zéro, avec ou sans interaction. Ensuite, il applique le formalisme FV-0 à l'oscillateur harmonique quantique relativiste et à l'atome pionique, en obtenant les spectres d'énergie et les fonctions d'onde correspondants. L'analyse montre que le formalisme FV-0 fournit des résultats compatibles avec la théorie standard de Klein-Gordon, tout en proposant une interprétation plus robuste de la densité et du courant de probabilité. Enfin, le mémoire introduit et compare une approche alternative de type Schrödinger pour les particules relativistes de spin zéro, mettant en évidence son efficacité pour certains problèmes tout en soulignant ses limites concernant le traitement explicite des états d'antiparticules.

À travers des solutions analytiques et une analyse comparative, ce travail confirme que le formalisme FV-0 constitue un cadre puissant et physiquement pertinent pour la description des systèmes quantiques relativistes de bosons de spin zéro. Les résultats obtenus offrent un nouvel éclairage sur la structure des équations d'onde relativistes et ouvrent des perspectives pour des recherches futures sur des systèmes plus complexes et des applications potentielles en physique des hautes énergies et en information quantique.

Dédicace

A mes chers parents, ma mère et mon père .
A mes sœurs ,
A mes frères ,
A ma famille ,
A tous mes amis ,
A tous mes collègues ,
A tous mes enseignants,

A tous ceux qui m'ont aidé de prés ou de loin, je dédie ce modeste travail.

.

Remerciements

Ce travail a été réalisé dans le cadre d'un projet de fin d'études, pour obtenir le diplôme de master en physique des matériaux de à l'Université Echahid Chikh Larbi Tébessi-Tébessa- . Avant tout, je remercie ALLAH tout puissant de nous avoir donné la volonté et le courage de mener à bien ce travail.

J'adresse mes sincères remerciements à mon encadreur le Professeur Abdelmalek Boumali pour m'avoir proposer mon sujet qui est aussi intéressant et riche et de m'avoir encadré pendant ce année. Je le remercie pour son savoir-faire, ses conseils, sa disponibilité et sa patience et Je le remercie pour ses discussions sympathiques et encourageantes. qui a contribué à la richesse de mon travail. J'exprime mes remerciements à M Chaouche Yassine, Professeur

à l'Université Echahid Chikh Larbi Tébessi-Tébessa-, pour l'honneur qu'il me fait en présidant le jury de mon these.

Je remercie vivement Mme Nadjette messai, Professeur à l'Université Echahid Chikh Larbi Tébessi-Tébessa-, qui a accepté d'être examinateur de cet these. Que ses remarques et ses critiques soient les bienvenues. Nous tenons également à exprimer notre gratitude aux nombreuses personnes qui nous ont apporté leur aide précieuse avec beaucoup de gentillesse.

Je voudrais remercier Bouzenada Abdelmalek pour son aide,conseillé et même supporté et pour ces qualité humaines. Je ne crois pas me tromper en disant que ses soutient a une valeur inestimable, je le remercie chaleureusement.

Je ne peux terminer sans remercier ma famille pour le constant et précieux soutien, moral et matériel, qu'ils m'ont apporté tout au long de mes études. À l'âme de Mon Père qui m'a appris les valeurs d'honneur, de respect, de modestie, de sincérité et d'amour du savoir illuminant le chemin de ma vie. À Ma Mère qui a su m'épauler chaque jour de cette thèse qui a su respecter mes décisions, qui m'a constamment encouragée dans les moments difficiles. MERCI ! ... MERCI !....

Table des matières

ملخص i

Abstract ii

Résumé iii

Dédicace iv

Remerciements v

Liste des Tableaux vii

Liste des Figures viii

Introduction 1

1 Forme hamiltonienne de l'équation de Klein-Gordon 4

1.1 L'équation de Klein-Gordon 4

1.2 Formalisme de Feshbach-Villars pour les particules de spin 0 7

1.2.1 Sans interaction 7

1.2.2 Avec interaction 8

1.3 Formalisme de type Schrödinger pour les particules de spin zéro en théorie quantique relativiste 10

1.3.1 Formalisme de type Schrödinger pour la théorie quantique relativiste 10

1.4 Formalisation Lagrangienne d'une équation d'onde relativiste de type Schrödinger . . . 13

1.4.1 Formalisme Lagrangien relativiste 13

1.4.2 Application a une particule de spin-0 14

2 Application du Formalisme de Feshbach-Villars (FV-0) 17

2.1 Oscillateur de Feshbach-Villars (FV-0) d'une particule scalaire de spin-0 dans un espace-temps de Minkowski 17

2.1.1 L'équation de KG sous forme de Schrödinger 17
2.1.2 Oscillateur de FV-0 unidimensionnel 19
2.2 Solutions de FV-0 pour le cas de l'atome pionique 20

3 Application du formalisme de Schrödinger relativiste 25
3.1 Potentiel de marche unidimensionnel (step potentiel) 25
3.1.1 cas ou $V < E - mc^2$. 26
3.1.2 cas ou $E - mc^2 < V < E + mc^2$. 29
3.1.3 cas ou $V > E + mc^2$. 32
3.2 Les solutions propres de l'atome pionique 33
3.3 L'oscillateur de Schrödinger relativiste 36
3.3.1 L'oscillateur de Klein-Gordon 36
3.3.2 L'oscillateur de Schrödinger relativiste 37
3.4 Comparaison technique entre l'oscillateur de Klein-Gordon et l'oscillateur de Schrödinger relativiste 38

Conclusion et Perspective 40

Liste des tableaux

Liste des Figures

3.1 Potentiel de marche unidimensionnel (Step potentiel) 25
3.2 Coefficients de réflexion R, de transmission T et leur somme en fonction de l'énergie, avec un potentiel $V_0 = 2$. 30

Introduction

La mécanique quantique relativiste vise à décrire les particules à des vitesses proches de celle de la lumière. Pour les particules de spin zéro, l'équation de référence est l'équation de Klein-Gordon. Cependant, cette équation pose des difficultés d'interprétation, notamment parce que la densité de probabilité qu'elle définit n'est pas toujours positive, ce qui rend problématique son interprétation comme une vraie probabilité de présence. Pour pallier cette limite, le formalisme de Feshbach-Villars (FV) reformule l'équation de Klein-Gordon sous une forme à deux composantes, séparant explicitement les solutions à énergie positive et négative, et permettant d'obtenir une densité de probabilité mieux définie et compatible avec les principes de la mécanique quantique.

Ce formalisme met aussi en lumière la symétrie de charge et la dualité particule-antiparticule, ce qui est fondamental pour comprendre des phénomènes comme le paradoxe de Klein, où la création de paires particule-antiparticule devient possible en présence de potentiels très élevés. En outre, la structure à deux composantes rapproche le traitement mathématique de celui de l'équation de Schrödinger, facilitant l'utilisation de méthodes familières de la mécanique quantique non relativiste pour aborder des problèmes relativistes.

Outre la reformulation de l'équation de Klein-Gordon via le formalisme de Feshbach-Villars, ce mémoire propose également une seconde approche basée sur un formalisme de type Schrödinger spécifiquement adapté aux particules de spin zéro en mécanique quantique relativiste. Cette méthode alternative, présentée dans le chapitre 1 et développée au chapitre 3, consiste à exploiter la structure de l'équation de Schrödinger tout en incorporant les corrections relativistes issues de la relation énergie-impulsion de la relativité restreinte.

Dans ce cadre, l'équation d'onde relativiste est construite à partir d'un Hamiltonien effectif, obtenu en isolant l'énergie dans la relation fondamentale $E^2 - p^2c^2 = m^2c^4$ et en tenant compte de l'influence d'un potentiel extérieur. L'équation obtenue prend la forme :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\psi(r,\tau) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{eff}}\right]\psi(r,\tau)$$

où le temps propre τ est relié au temps coordonné par $dt = \gamma d\tau$, et où le potentiel effectif V_{eff} contient les corrections relativistes. Cette formulation présente l'avantage de conserver une densité de prob-

abilité toujours positive, facilitant ainsi son interprétation physique et la conservation du courant de probabilité. L'approche de type Schrödinger permet d'aborder des problèmes standards de mécanique quantique relativiste (oscillateur harmonique relativiste, atome pionique, potentiel de marche) en utilisant des outils familiers de la mécanique quantique non relativiste, tout en assurant la cohérence avec la théorie de Klein-Gordon. Elle se distingue notamment par sa simplicité d'application et sa capacité à fournir des solutions analytiques pour des systèmes complexes, tout en évitant les difficultés liées à la non-positivité de la densité de probabilité dans la formulation standard de Klein-Gordon.

En intégrant cette seconde approche, le mémoire offre ainsi une vision comparative et complémentaire des différentes formulations de l'équation de Klein-Gordon pour les particules de spin zéro, et met en lumière les avantages conceptuels et pratiques de chaque méthode dans la résolution de problèmes quantiques relativistes.

Le mémoire vise à étudier l'oscillateur harmonique relativiste unidimensionnel pour une particule de spin zéro à travers le formalisme de Feshbach-Villars (FV-0). Les objectifs sont :

- Établir la forme hamiltonienne de l'équation de Klein-Gordon et expliciter la structure à deux composantes du formalisme FV, en détaillant comment la séparation des solutions à énergie positive et négative permet d'interpréter correctement la densité de probabilité et le courant associés à la fonction d'onde.

- Appliquer le formalisme FV à l'oscillateur harmonique relativiste unidimensionnel, en dérivant le spectre d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes. Cette analyse permet de comparer le spectre obtenu à celui de l'oscillateur harmonique quantique classique et de mettre en évidence les corrections relativistes apportées par la théorie.

- Étendre l'étude au cas de l'atome pionique, un système où un pion (particule de spin zéro) est lié à un noyau atomique par une interaction coulombienne. Ce système est un modèle idéal pour tester l'impact des effets relativistes et quantiques sur les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde, et pour comparer les résultats obtenus avec ceux de la théorie de Klein-Gordon standard.

- Comparer les résultats issus du formalisme FV avec ceux obtenus par d'autres méthodes, notamment le formalisme de type Schrödinger, afin de discuter les avantages, les limites et les implications physiques de chaque approche pour la description des systèmes quantiques relativistes de spin zéro.

Le mémoire est structuré en trois grands chapitres, chacun abordant un aspect clé de la problématique :

Chapitre 1, présente la formulation hamiltonienne de l'équation de Klein-Gordon, introduit le formalisme FV pour les particules de spin zéro, et expose le formalisme de type Schrödinger pour

la dynamique quantique relativiste. Ce chapitre détaille la structure mathématique des équations, la définition des densités de probabilité et de courant, ainsi que la formalisation lagrangienne adaptée à la mécanique quantique relativiste.

Chapitre 2 : Applique le formalisme FV-0 à l'oscillateur harmonique relativiste unidimensionnel, en explicitant les équations différentielles, les conditions de quantification et le spectre d'énergie. Ce chapitre traite aussi le cas de l'atome pionique, en développant la résolution des équations radiales et l'obtention des niveaux d'énergie, tout en discutant la question de la densité de probabilité et de sa positivité.

Chapitre 3 Présente une approche alternative basée sur l'équation de Schrödinger relativiste, en appliquant cette méthode à des problèmes classiques comme le potentiel de marche unidimensionnel et l'atome pionique. Ce chapitre permet de mettre en perspective les résultats obtenus avec le formalisme FV et d'en discuter la cohérence et la portée physique.

La conclusion du mémoire synthétise les résultats obtenus, en soulignant que le formalisme de Feshbach-Villars permet d'obtenir une description cohérente et physiquement interprétable des systèmes quantiques relativistes de spin zéro. Il offre une alternative robuste à la théorie de Klein-Gordon, notamment pour l'interprétation de la densité de probabilité et l'analyse des phénomènes où la distinction entre particule et antiparticule est essentielle. Le mémoire ouvre également des perspectives pour des recherches futures, comme l'application du formalisme FV à d'autres systèmes (potentiels plus complexes, dimensions supérieures, effets de champ magnétique, etc.) et l'étude des implications en information quantique (paramètres de Fisher et d'entropie de Shannon).

Chapitre 1

Forme hamiltonienne de l'équation de Klein-Gordon

1.1 L'équation de Klein-Gordon

Nous commençons par étudier la relation entre l'énergie et la quantité de mouvement pour des particules libres à l'aide de la mécanique relativiste [1–7] :

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4 \tag{1.1}$$

En utilisant la relation de correspondance :

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad p \to -i\hbar\nabla \tag{1.2}$$

où ∇ est l'opérateur nabla, défini comme :

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \tag{1.3}$$

En substituant ces correspondances dans l'équation (1.1), on obtient :

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2} = -\hbar^2c^2\nabla^2 + m^2c^4 \tag{1.4}$$

En multipliant cette équation par la fonction d'onde $\Psi(r,t)$, nous arrivons à l'équation de Klein-Gordon (K-G) pour les particules relativistes de spin 0 :

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi(r,t)}{\partial t^2} = \left(-c^2\hbar^2\nabla^2 + m^2c^4\right)\psi(r,t) \tag{1.5}$$

où $\nabla^2 = \Delta$ représente le laplacien, défini par :

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{1.6}$$

Les unités naturelles sont choisies de sorte que les constantes fondamentales, telles que la constante de Planck et la vitesse de la lumière, soient égales à 1. Ces unités sont particulièrement utiles dans les systèmes physiques qui combinent relativité et quantification. Dans ces unités, l'équation (1.5) se simplifie ainsi :

$$-\frac{\partial^2\psi(r,t)}{\partial t^2} = \left(-\nabla^2 + m^2\right)\psi(r,t) \tag{1.7}$$

L'équation de Klein-Gordon pour les particules relativistes de spin 0 peut alors s'écrire :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + m^2\right)\psi(r,t) = 0 \tag{1.8}$$

ou encore :

$$\left(\Box + m^2\right)\psi(r,t) = 0 \tag{1.9}$$

où

$$\Box = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \tag{1.10}$$

C'est l'opérateur d'Alembert, également noté :

$$\Box = g^{\mu\nu}\partial_\mu\partial_\nu \tag{1.11}$$

Dans un espace unidimensionnel, l'équation de Klein-Gordon devient :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + m^2\right)\psi(r,t) = 0 \tag{1.12}$$

Il est possible de calculer la densité de probabilité et la densité de courant de la manière suivante :

$$\rho(r,t) = \frac{i}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) \tag{1.13}$$

$$J(r,t) = \frac{i}{2m}\left(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right) \tag{1.14}$$

Pour déterminer la densité de probabilité et la densité de courant à partir de l'équation de Klein-Gordon, nous partons de l'équation (1.14) de Klein-Gordon pour des particules sans spin, dans les unités naturelles ($\hbar = c = 1$) :

$$\left(\Box + m^2\right)\Psi = 0 \tag{1.15}$$

Pour la démonstration, nous avons besoin de l'équation de Klein-Gordon et de son conjugué complexe :

$$\left(\Box + m^2\right)\psi = 0 \tag{1.16}$$

$$\left(\Box + m^2\right)\psi^* = 0 \tag{1.17}$$

Nous multiplions la première équation par ψ^* et la seconde par ψ, puis nous soustrayons la seconde de la première :

$$\psi^* \left(\Box + m^2\right) \psi - \psi \left(\Box + m^2\right) \psi^* = 0 \tag{1.18}$$

Ce qui donne :

$$\psi^* \Box \psi + m^2 \psi^* \psi - \psi \Box \psi^* - m^2 \psi \psi^* = 0 \tag{1.19}$$

Les termes de masse m^2 se simplifient, d'où :

$$\psi^* \Box \psi - \psi \Box \psi^* = 0 \tag{1.20}$$

En développant $\Box$, on obtient :

$$\psi^* \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \nabla^2 \psi\right) - \psi \left(\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial t^2} - \nabla^2 \psi^*\right) = 0 \tag{1.21}$$

Ce qui s'écrit :

$$\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial t^2} - \psi^* \nabla^2 \psi + \psi \nabla^2 \psi^* = 0 \tag{1.22}$$

En réorganisant les termes :

$$\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial t^2} = \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \tag{1.23}$$

On reconnaît que le membre de droite est une divergence :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right) = \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \tag{1.24}$$

On définit alors :

$$\rho = \frac{i}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right) \tag{1.25}$$

$$J = \frac{i}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \tag{1.26}$$

En utilisant ces définitions, on obtient l'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0 \tag{1.27}$$

Cette équation exprime le principe de conservation de la probabilité, où ρ est la densité de probabilité et J la densité de courant associée à la fonction d'onde ψ.

1.2 Formalisme de Feshbach-Villars pour les particules de spin 0

Le formalisme de Feshbach-Villars (FV) constitue une reformulation puissante de l'équation de Klein-Gordon pour les particules de spin 0. Il permet de traiter de manière explicite la structure particule-antiparticule de la théorie relativiste et facilite la séparation des solutions à énergie positive et négative. Ce formalisme met en avant la symétrie fondamentale de charge et fournit une interprétation plus claire de la densité de probabilité et du courant associés à la fonction d'onde. L'approche FV est particulièrement utile pour l'analyse de phénomènes relativistes tels que le paradoxe de Klein, où la création de paires particule-antiparticule devient possible en présence de potentiels élevés. En outre, la structure à deux composantes de la fonction d'onde permet de relier naturellement les propriétés de charge et de normalisation des états propres, tout en conservant la cohérence avec la physique relativiste [8–13].

1.2.1 Sans interaction

En l'absence d'interaction, l'équation de Klein-Gordon peut être reformulée sous forme hamiltonienne en décomposant ψ de la manière suivante (1.27) :

$$\psi = \varphi + \chi \tag{1.28}$$

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - V\right)\psi = m\left(\varphi - \chi\right) \tag{1.29}$$

Les deux composantes φ et χ s'expriment alors comme :

$$\varphi = \frac{1}{2}\left[\left(1 - \frac{V}{m}\right)\psi + \frac{i}{m}\frac{\partial}{\partial t}\psi\right] \tag{1.30}$$

$$\chi = \frac{1}{2}\left[\left(1 + \frac{V}{m}\right)\psi - \frac{i}{m}\frac{\partial}{\partial t}\psi\right] \tag{1.31}$$

Lorsque φ et χ sont insérés dans l'équation de Klein-Gordon, on obtient :

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - V\right)\left(\varphi + \chi\right) = m\left(\varphi - \chi\right) \tag{1.32}$$

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - V\right)\left(\varphi - \chi\right) = \left[\frac{P^2}{m} + m\right]\left(\varphi + \chi\right) \tag{1.33}$$

En réarrangeant ces équations, on obtient un système exprimé sous forme de dérivées temporelles du premier ordre :

$$i\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{P^2}{2m}\left(\varphi - \chi\right) + (m + V)\varphi \tag{1.34}$$

$$i\frac{\partial\chi}{\partial t} = -\frac{p^2}{2m}(\varphi+\chi) - (m-V)\chi \tag{1.35}$$

Ces équations, connues sous le nom d'équations de Feshbach-Villars pour les particules de spin 0 (FV-0), mettent en évidence une structure hamiltonienne accentuée avec un vecteur à deux composantes :

$$\psi = \begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} \tag{1.36}$$

L'équation (1.36) prend alors la forme suivante :

$$\mathcal{H}_{FV0} = (\tau_3 + i\tau_2)\frac{p^2}{2m} + \tau_3 m + V \tag{1.37}$$

où τ_i $(i = 1, 2, 3)$ représentent les matrices de Pauli usuelles 2×2 :

$$\tau_1 = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\ \tau_2 = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\ \tau_3 = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{1.38}$$

Finalement, la densité de probabilité et le courant s'écrivent :

$$\rho(r,t) = \varphi\varphi^* - \chi\chi^* = \psi\tau_3\psi^\dagger \tag{1.39}$$

$$J(r,t) = \frac{i}{2m}\left(\psi^*\tau_3(\tau_3+i\tau_2)\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\tau_3(\tau_3+i\tau_2)\psi\right) \tag{1.40}$$

1.2.2 Avec interaction

Dans le cas d'une particule de spin 0 évoluant dans l'espace-temps de Minkowski, l'équation de Klein-Gordon covariante pour un champ scalaire massif Φ de masse $m > 0$ s'écrit :

$$\left(\eta^{\mu\nu}D_\mu D_\nu + m^2\right)\psi(x,t) = 0 \tag{1.41}$$

où la dérivée covariante à couplage minimal est $D_\mu = -i(P_\mu - eA_\mu)$, avec $P_\mu = (E, -P)$ et $A_\mu = (A_0, A)$.

L'équation peut être reformulée sous forme hamiltonienne, analogue à une équation de Schrödinger :

$$\mathcal{H}\psi(x,t) = i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) \tag{1.42}$$

L'Hamiltonien $\mathcal{H}$ est défini via la linéarisation de Feshbach-Villars :

$$\psi(x,t) = \begin{pmatrix}\varphi(x,t)\\ \chi(x,t)\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1+\frac{i}{m}D\\ 1-\frac{i}{m}D\end{pmatrix}\psi(x,t) \tag{1.43}$$

avec $D = \frac{\partial}{\partial t} + ieA_0(x)$. Les composantes sont alors :

$$\varphi = \frac{1}{2m}\left[m + i\frac{\partial}{\partial t} - eA_0\right]\psi \tag{1.44}$$

$$\chi = \frac{1}{2m}\left[m - i\frac{\partial}{\partial t} - eA_0\right]\psi \tag{1.45}$$

L'équation (1.41) devient :

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} - eA_0\right](\varphi + \chi) = m(\varphi - \chi) \tag{1.46}$$

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} - eA_0\right](\varphi + \chi) = \left[\frac{(P_i - eA_i)^2}{m} + m\right](\varphi + \chi) \tag{1.47}$$

En combinant ces équations, on obtient un système différentiel couplé du premier ordre :

$$i\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\frac{1}{i}\nabla - eA\right)^2(\varphi + \chi) + (eV_0 + m)\varphi \tag{1.48}$$

$$i\frac{\partial\chi}{\partial t} = -\frac{1}{2m}\left(\frac{1}{i}\nabla - eA\right)^2(\varphi + \chi) + (eV_0 + m)\chi \tag{1.49}$$

L'Hamiltonien FV pour une particule scalaire sous interaction électromagnétique est alors :

$$\mathcal{H}_{FV} = (\tau_3 + i\tau_2)\frac{(P_i - eA_i)^2}{2m} + m\tau_3 + eA_0(x) \tag{1.50}$$

Cet Hamiltonien respecte la généralisation hermitienne :

$$\mathcal{H}_{FV} = \tau_3\mathcal{H}_{FV}^{\dagger}\tau_3, \quad \mathcal{H}_{FV}^{\dagger} = \tau_3\mathcal{H}_{FV}\tau_3 \tag{1.51}$$

Pour une particule libre ($A_\mu = 0$), l'Hamiltonien se réduit à :

$$H_0 = (\tau_3 + i\tau_2)\frac{P^2}{2m} + m\tau_3 \tag{1.52}$$

Les solutions stationnaires de l'Hamiltonien libre correspondent à :

$$H_0\psi(x) = E\psi(x) \tag{1.53}$$

La densité de probabilité et le courant sont donnés par :

$$\rho(r,t) = \varphi\varphi^* - \chi\chi^* = \psi\tau_3\psi^{\dagger} \tag{1.54}$$

$$J(r,t) = \frac{i}{2m}\left(\psi^*\tau_3(\tau_3 + i\tau_2)\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\tau_3(\tau_3 + i\tau_2)\psi\right) - \frac{e}{m}A\psi^*\tau_3(\tau_3 + i\tau_2)\psi \tag{1.55}$$

1.3 Formalisme de type Schrödinger pour les particules de spin zéro en théorie quantique relativiste

En théorie quantique relativiste, l'équation de Dirac constitue le cadre fondamental pour la description des particules de spin $1/2$, tandis que l'équation de Klein-Gordon s'applique aux particules de spin zéro. Cette section introduit un formalisme de type Schrödinger spécifiquement adapté à la dynamique quantique relativiste des particules de spin zéro. Il est démontré que cette approche offre une méthode simple et intuitive pour traiter les problèmes quantiques relativistes, en s'inspirant de la méthodologie de l'équation d'onde de Schrödinger et de la formulation conventionnelle de Klein-Gordon, tout en mettant en évidence leurs spécificités et domaines d'application respectifs [14–16].

1.3.1 Formalisme de type Schrödinger pour la théorie quantique relativiste

Selon la relativité restreinte, l'énergie totale E et l'impulsion p d'une particule libre sont données par :

$$E = \gamma mc^2, \quad p = \gamma mv \tag{1.56}$$

où m est la masse au repos, c la vitesse de la lumière, et $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$ le facteur de Lorentz. La relation énergie-impulsion s'écrit alors :

$$E^2 - p^2c^2 = m^2c^4 \tag{1.57}$$

On en déduit :

$$H_{eff} = \frac{p^2}{2m} \tag{1.58}$$

En définissant :

$$H_{eff} \equiv \frac{E^2 - m^2c^4}{2mc^2} \tag{1.59}$$

le Hamiltonien effectif pour une particule libre est :

$$H_{eff} = \frac{1}{2}mu^2, \quad \text{avec } u = \gamma v \tag{1.60}$$

Pour obtenir l'équation d'onde du système, on remplace les grandeurs classiques par leurs opérateurs quantiques :

$$p \to \hbar\nabla, \quad H_{eff} \to \hbar\frac{\partial}{\partial\tau} \tag{1.61}$$

et l'équation opératorielle s'applique à la fonction d'onde $\psi(r,\tau)$, ce qui donne :

$$\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\psi(r,\tau) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,\tau) \tag{1.62}$$

Ici, τ représente le temps propre, relié au temps coordonné t par $t = \gamma\tau$. L'équation d'onde de type Schrödinger (1.62) admet une solution plane :

$$\psi(r,\tau) = A\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(H_{eff}\tau - p\cdot r)\right] \tag{1.63}$$

Grâce à la linéarité de l'équation, un paquet d'ondes planes de la forme

$$\psi(r,\tau) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int A(p)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(H_{eff}(p)\tau \mp p\cdot r)\right]d^3p \tag{1.64}$$

est également solution. Pour généraliser, considérons une particule relativiste dans un potentiel $V(r)$. Selon la relativité restreinte :

$$(E-V)^2 - p^2c^2 = m^2c^4 \tag{1.65}$$

En reformulant (1.59) et en utilisant (1.65), on obtient :

$$H_{eff} = \frac{p^2}{2m} + V_{eff}, \quad V_{eff} = \frac{2EV - V^2}{2mc^2} \tag{1.66}$$

Ici, H_{eff} représente la somme de l'énergie cinétique relativiste et de l'énergie potentielle effective. En appliquant les substitutions opératorielle à $\psi(r,\tau)$, on obtient l'équation d'onde de type Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\psi(r,\tau) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{eff}\right)\psi(r,\tau) \tag{1.67}$$

Comme en mécanique quantique non relativiste, la densité de probabilité est :

$$\varrho = \psi^*(r,\tau)\psi(r,\tau) \tag{1.68}$$

et elle satisfait l'équation de continuité :

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\varrho + \nabla\cdot J = 0 \tag{1.69}$$

avec

$$J = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \tag{1.70}$$

La densité de probabilité est positive et sa conservation est assurée par l'équation de continuité.

Si $\psi(r,\tau)$ est normalisée, l'espérance d'un opérateur dynamique $\hat{O}$ s'écrit :

$$\langle O\rangle = \int \psi^*(r,t)\hat{O}\psi(r,t)d^3r, \quad \hat{O} = O(r,-i\hbar\nabla) \tag{1.71}$$

Le taux de variation de l'espérance du vecteur position donne :

$$\frac{d\langle r\rangle}{d\tau} = \frac{\langle p\rangle}{m} \tag{1.72}$$

ce qui correspond à la version quantique de la relation classique $p = \gamma mv$.

Dans la théorie de Klein-Gordon, pour une particule libre de spin 0, l'Hamiltonien sous forme de Schrödinger est :

$$\hat{H} = (\hat{\sigma}_3 + i\hat{\sigma}_2)\frac{\hat{p}^2}{2m} + mc^2\hat{\sigma}_3 \tag{1.73}$$

où $\hat{\sigma}_2$ et $\hat{\sigma}_3$ sont des matrices de Pauli :

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.74}$$

L'opérateur vitesse pour une particule libre de spin 0 s'écrit :

$$\frac{d\hat{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{r}, \hat{H}] = (\hat{\sigma}_3 + i\hat{\sigma}_2)\frac{\hat{p}}{m} \tag{1.75}$$

Les valeurs propres de $\hat{\sigma}_3 + i\hat{\sigma}_2$ étant nulles, la valeur moyenne de la vitesse est donc toujours nulle.

L'opérateur de position est défini par :

$$\hat{r}(t) = \hat{r}(0) + \frac{\hat{p}}{H}t + \frac{e^{2iHt} - 1}{2iH}\left(\hat{V}(0) - \frac{\hat{p}}{H}\right) \tag{1.76}$$

Le dernier terme décrit le phénomène de "Zitterbewegung", une oscillation rapide même sans interaction externe.

La théorie de Klein-Gordon ne satisfait pas pleinement le théorème d'Ehrenfest, contrairement au formalisme de type Schrödinger présenté ici. Pour une particule de charge e dans un champ électromagnétique externe, la relation énergie-impulsion relativiste devient :

$$(E - e\Phi)^2 - (p - \frac{e}{c}A)^2c^2 = m^2c^4 \tag{1.77}$$

où $P = p - \frac{e}{c}A$ est l'impulsion généralisée, $\Phi(r,t)$ le potentiel scalaire et $A(r,t)$ le potentiel vecteur. Cette équation se reformule :

$$H_{eff} = \frac{(P - \frac{e}{c}A)^2}{2m} + V_{eff}, \quad V_{eff} = \frac{2EV - V^2}{2mc^2}, \quad V = e\varphi \tag{1.78}$$

L'équation d'onde correspondante est :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\psi(r,\tau) = \left[\frac{(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}A)^2}{2m} + V_{eff}\right]\psi(r,\tau) \tag{1.79}$$

Cette équation conserve sa forme dans tous les référentiels inertiels grâce à la covariance de Lorentz de la relation énergie-impulsion.

1.4 Formalisation Lagrangienne d'une équation d'onde relativiste de type Schrödinger

1.4.1 Formalisme Lagrangien relativiste

Considérons le lagrangien $L(x, x')$ d'une particule relativiste, où x' est la dérivée de x par rapport au temps scalaire ξ, relié au temps coordonné par $dt = \sigma d\xi$.

Selon le principe de Hamilton , la variation d'action s'écrit :

$$\delta \int_1^2 L(x, x')d\xi = 0 \tag{1.80}$$

En introduisant une variation infinitésimale du chemin, on obtient :

$$\delta x_j(\xi), \quad \delta x'_j = \frac{d}{d\xi}(\delta x_j) \tag{1.81}$$

Après intégration par parties et application des conditions aux limites (Dirichlet homogènes), on arrive à :

$$\frac{\partial L}{\partial x_j} - \frac{d}{d\xi}\left(\frac{\partial L}{\partial x'_j}\right) = 0 \tag{1.82}$$

Soit, en termes d'impulsion canonique $p_j^c = \frac{\partial L}{\partial x'_j}$:

$$\dot{p_j^c} = \frac{\partial L}{\partial x_j} \tag{1.83}$$

Le Hamiltonien $\mathcal{H}$ s'obtient par transformation de Legendre :

$$H(x_j, p_j^c) = \sum_j p_j^c x'_j - L(x_j, x'_j) \tag{1.84}$$

Sa différentielle totale est :

$$dH = \sum_j \left(\frac{\partial H}{\partial x_j}dx_j + \frac{\partial H}{\partial p_j^c}dp_j^c\right) \tag{1.85}$$

Les équations du mouvement prennent alors la forme hamiltonienne :

$$\frac{dx_j}{d\xi} = \frac{\partial H}{\partial p_j^c}, \quad \frac{dp_j^c}{d\xi} = -\frac{\partial H}{\partial x_j} \tag{1.86}$$

La dérivation temporelle d'une fonction arbitraire $M(x_j, p_j^c)$ s'exprime à l'aide du crochet de Poisson :

$$\frac{dM}{dt} = \{M, H\} \tag{1.87}$$

avec

$$\{M,N\}=\sum_j\left(\frac{\partial M}{\partial x_j}\frac{\partial N}{\partial p_j^c}-\frac{\partial M}{\partial p_j^c}\frac{\partial N}{\partial x_j}\right) \tag{1.88}$$

Les équations hamiltoniennes du mouvement s'écrivent donc :

$$\frac{dx_j}{d\xi}=\{x_j,H\},\quad \frac{dp_j^c}{d\xi}=\{p_j^c,H\} \tag{1.89}$$

1.4.2 Application a une particule de spin-0

Considérons une particule évoluant dans un champ de potentiel scalaire de Lorentz $S(x,t)$. Bien que la signification physique précise de ce potentiel ne soit pas complètement établie, il est généralement admis qu'il se couple à la masse au repos de la particule, ce qui conduit à la relation énergie-impulsion relativiste suivante :

$$E^2-p^2c^2=\left(m+\frac{S(x,t)}{c^2}\right)^2c^4 \tag{1.90}$$

Dans ce cadre, l'énergie totale de la particule s'exprime :

$$E=\gamma\left(m+\frac{S(x,t)}{c^2}\right)c^2 \tag{1.91}$$

et l'impulsion relativiste :

$$\mathbf{p}=\gamma\left(m+\frac{S(x,t)}{c^2}\right)\mathbf{v} \tag{1.92}$$

Conformément à la littérature, nous limitons ici l'analyse aux potentiels scalaires de Lorentz ne dépendant que de la position. Cette hypothèse permet d'obtenir l'équation du mouvement en dérivant temporellement la relation fondamentale (1.90), tout en considérant la conservation de l'énergie totale E. On obtient alors :

$$\gamma^2\left(m+\frac{S(x)}{c^2}\right)\frac{dv}{dt}=-\nabla S(x) \tag{1.93}$$

En adoptant une approche analogue à la mécanique lagrangienne relativiste classique, où le temps propre est utilisé comme paramètre d'évolution (8), nous introduisons un lagrangien $L(x,\mathring{x})$ pour une particule relativiste soumise à un potentiel scalaire de Lorentz.

Dans ce contexte, un temps redimensionné t est utilisé comme paramètre d'évolution, avec $\mathring{x}=\frac{dx}{dt}$ la dérivée spatiale par rapport à ce temps modifié. La relation entre ce temps redimensionné et le temps coordonné est donnée par :

$$dt=s\,dt \tag{1.94}$$

où le facteur de redimensionnement est :

$$s=\frac{E}{mc^2} \tag{1.95}$$

On définit également :

$$K = \frac{E^2 - m^2c^4}{2mc^2} \tag{1.96}$$

et

$$S_{eff} \equiv \frac{2mc^2 S(x) + S(x)^2}{2mc^2} \tag{1.97}$$

L'équation fondamentale (1.90) peut alors se réécrire :

$$K = \frac{p^2}{2m} + S_{eff} \tag{1.98}$$

Le lagrangien relativiste associé prend la forme :

$$L(x, \mathring{x}) = \frac{1}{2}mu^2 - S_{eff} \tag{1.99}$$

où $u = \mathring{x} = \frac{dx}{dt}$. L'impulsion canonique p_j^c associée à la coordonnée x s'exprime :

$$p_j^c = \frac{\partial L}{\partial u_j} = \sigma m v_j, \quad j = 1, 2, 3 \tag{1.100}$$

L'application du formalisme lagrangien relativiste conduit aux équations fondamentales du mouvement :

$$\frac{\partial L}{\partial x_j} - \frac{d}{d\xi}\frac{\partial L}{\partial \mathring{x}_j} = 0, \quad j = 1, 2, 3 \tag{1.101}$$

L'équation du mouvement (1.101) est obtenue sous la condition fondamentale :

$$E = \gamma \left[m + \frac{S(x)}{c^2} \right] c^2 \tag{1.102}$$

avec $\gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}$ le facteur de Lorentz. Cette condition implique :

- L'égalité entre l'impulsion canonique p^c et l'impulsion physique p :

$$p^c \equiv p = \gamma \left[m + \frac{S(x)}{c^2} \right] v \tag{1.103}$$

- La validité de la relation énergie-impulsion relativiste (1.90).

Ces résultats découlent directement des équations de Lagrange relativistes (1.101), spécifiées par l'équation (1.99), ce qui confirme la cohérence du formalisme proposé.

Selon les principes de la mécanique analytique relativiste, l'hamiltonien s'obtient par transformation de Legendre du lagrangien :

$$H(x_j, p_j^c) = \sum_j p_j^c \mathring{x}_j - L(x_j, \mathring{x}_j) \tag{1.104}$$

On obtient alors :

$$H = \frac{p^2}{2m} + S_{eff} \tag{1.105}$$

Il convient de souligner que dans ce cadre, l'hamiltonien relativiste H ne correspond pas à l'énergie totale E, mais s'exprime plutôt :

$$K = \frac{E^2 - m^2c^4}{2mc^2} \tag{1.106}$$

où K représente l'énergie cinétique effective. La quantification canonique de cette équation suit deux étapes :

- Premièrement, on remplace les grandeurs physiques p^c et H par leurs opérateurs quantiques respectifs :

$$p^c \to -i\hbar\nabla, \quad H \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{1.107}$$

où $\hbar$ est la constante de Planck réduite.

- Deuxièmement, l'application de cette équation opératorielle à la fonction d'onde $\psi(x,t)$ permet d'obtenir l'équation dynamique complète. Cette démarche, conforme aux prescriptions standards de la théorie quantique (1.107), établit une correspondance rigoureuse entre la description hamiltonienne classique et son analogue quantique, tout en préservant les invariants relativistes fondamentaux :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial\xi}\psi(x,\xi) = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + S_{eff}\right]\psi(x,\xi) \tag{1.108}$$

Ce formalisme ondulatoire relativiste, inspiré de l'approche de Schrödinger, ouvre la voie à l'exploration de phénomènes quantiques avancés dans le cadre des potentiels scalaires de Lorentz.

Chapitre 2

Application du Formalisme de Feshbach-Villars (FV-0)

2.1 Oscillateur de Feshbach-Villars (FV-0) d'une particule scalaire de spin-0 dans un espace-temps de Minkowski

2.1.1 L'équation de KG sous forme de Schrödinger

Dans cette section, nous traitons la description quantique relativiste d'une particule de spin 0 se propageant dans l'espace-temps de Minkowski avec le tenseur métrique $\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$. Pour une particule scalaire massive Φ de masse $m > 0$, l'équation covariante standard de Klein-Gordon s'écrit [1, 2] :

$$\left(\eta^{\mu v} D_\mu D_v + m^2\right) \Phi(x,t) = 0 \tag{2.1}$$

où

$$D_\mu = i\left(p_\mu - eA_\mu\right) \tag{2.2}$$

désigne la dérivée covariante couplée de façon minimale, avec e qui représente la magnitude de la charge de la particule. Ici, $p_\mu = (E, -p_i)$ est le quadri-vecteur impulsion canonique et $A_\mu = (A_0, -A_i)$ est le quadri-potentiel électromagnétique.

À ce stade, il convient de souligner que l'équation (2.1) peut être réécrite sous une forme hamiltonienne avec la dérivée première par rapport au temps, c'est-à-dire, une équation de Schrödinger :

$$\mathcal{H}\Phi(x,t) = i\frac{\partial}{\partial t}\Phi(x,t) \tag{2.3}$$

L'hamiltonien $\mathcal{H}$ peut être défini en utilisant la procédure de linéarisation de Feshbach-Villars (FV) [8, 10, 11, 17], c'est-à-dire, en transformant l'équation (2.1) en une équation différentielle du premier

ordre par rapport au temps. Nous introduisons la fonction d'onde à deux composantes :

$$\Phi(x,t)=\begin{pmatrix}\phi_1(x,t)\\ \phi_2(x,t)\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1+\frac{i}{m}\mathcal{D}\\ 1-\frac{i}{m}\mathcal{D}\end{pmatrix}\psi(x,t) \tag{2.4}$$

où $\psi(x,t)$ obéit à l'équation d'onde de Klein-Gordon, et nous avons défini $\mathcal{D}$ tel que

$$\mathcal{D}=\frac{\partial}{\partial t}+ieA_0(x) \tag{2.5}$$

La transformation ci-dessus (2.4) consiste à introduire des fonctions d'onde satisfaisant les conditions

$$\psi=\phi_1+\phi_2,\quad i\mathcal{D}\psi=m\left(\phi_1-\phi_2\right). \tag{2.6}$$

Pour notre revue ultérieure, il est pratique d'écrire

$$\begin{aligned}\phi_1&=\frac{1}{2m}\left[m+i\frac{\partial}{\partial t}-eA_0\right]\psi\\ \phi_2&=\frac{1}{2m}\left[m-i\frac{\partial}{\partial t}+eA_0\right]\psi.\end{aligned} \tag{2.7}$$

De façon équivalente, (2.7) devient

$$\begin{aligned}\left[i\frac{\partial}{\partial t}-eA_0\right]\left(\phi_1+\phi_2\right)&=m\left(\phi_1-\phi_2\right)\\ \left[i\frac{\partial}{\partial t}-eA_0\right]\left(\phi_1-\phi_2\right)&=\left[\frac{\left(p_i-eA_i\right)^2}{m}+m\right]\left(\phi_1+\phi_2\right)\end{aligned} \tag{2.8}$$

L'addition et la soustraction de ces deux équations conduisent à un système d'équations différentielles couplées du premier ordre par rapport au temps,

$$\begin{aligned}\frac{\left(p_i-eA_i\right)^2}{2m}\left(\phi_1+\phi_2\right)+\left(m+eA_0\right)\phi_1&=i\frac{\partial\phi_1}{\partial t}\\ \frac{-\left(p_i-eA_i\right)^2}{2m}\left(\phi_1+\phi_2\right)-\left(m-eA_0\right)\phi_2&=i\frac{\partial\phi_2}{\partial t}\end{aligned} \tag{2.9}$$

À l'aide de l'équation (2.6), l'Hamiltonien de Feshbach-Villars d'une particule scalaire en présence d'interaction électromagnétique peut s'écrire comme

$$\mathcal{H}_{\text{FV}}=\left(\tau_z+i\tau_y\right)\frac{\left(p_i-eA_i\right)^2}{2m}+m\tau_z+eA_0(x) \tag{2.10}$$

où $\tau_i(i=x,y,z)$ sont les matrices de Pauli conventionnelles 2×2 données par

$$\tau_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \tau_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \tau_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{2.11}$$

Il est à noter que l'Hamiltonien (2.6) satisfait la condition d'hermiticité généralisée,

$$\mathcal{H}_{\rm FV} = \tau_z \mathcal{H}_{\rm FV}^{\dagger} \tau_z, \quad \mathcal{H}_{\rm FV}^{\dagger} = \tau_z \mathcal{H}_{\rm FV} \tau_z. \tag{2.12}$$

Pour la propagation d'une particule libre, c'est-à-dire sans interaction considérée ($A_\mu = 0$), l'Hamiltonien unidimensionnel de FV se simplifie en

$$\left(\mathcal{H}_{\rm FV}\right)_0 = \left(\tau_z + i\tau_y\right) \frac{p_x^2}{2m} + m\tau_z \tag{2.13}$$

Les solutions de l'Hamiltonien libre (qui est indépendant du temps) sont simplement des états stationnaires. En supposant une solution de la forme ,

$$\Phi(x,t) = \Phi(x) e^{-iEt} = \begin{pmatrix} \phi_1(x) \\ \phi_2(x) \end{pmatrix} e^{-iEt}, \tag{2.14}$$

avec E étant l'énergie du système. Dans ce cas, (2.3) peut alors s'écrire

$$\left(\mathcal{H}_{\rm FV}\right)_0 \Phi(x) = E\Phi(x) \tag{2.15}$$

qui est l'équation FV unidimensionnelle de la particule relativiste libre de spin-0 et est établie dans le but d'avoir une alternative de type Schrödinger à l'équation de Klein-Gordon.

2.1.2 Oscillateur de FV-0 unidimensionnel

Pour la discussion suivante, il est préférable d'analyser l'oscillateur de Klein-Gordon (OKG) dans l'espace-temps de Minkowski en utilisant la méthode décrite ci-dessus. Pour examiner l'oscillateur de Klein-Gordon dans la représentation de Feshbach-Villars (FV), nous commençons par la substitution minimale $p \longrightarrow p - im\omega x$ de l'opérateur d'impulsion. Ici, ω est la fréquence d'oscillation et $x_\mu = (0, x, 0, 0)$. Ainsi, en généralisant l'opérateur d'impulsion, l'Hamiltonien FV unidimensionnel (2.3) devient

$$\mathcal{H}_{\rm FVO} = \frac{1}{2m} \left(\tau_z + i\tau_y\right) \left(p_x + im\omega x\right) \left(p_x - im\omega x\right) + m\tau_z \tag{2.16}$$

De cette façon, la formulation de Schrödinger de l'OKG en une dimension est obtenue en remplaçant l'ansatz (2.3) dans (2.3) avec ce qui suit :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m}\left[\frac{d^2}{dx^2} - m^2\omega^2 x^2 + m\omega\right](\phi_1 + \phi_2) + m\phi_1 &= E\phi_1 \\ -\frac{1}{2m}\left[\frac{d^2}{dx^2} - m^2\omega^2 x^2 + m\omega\right](\phi_1 + \phi_2) - m\phi_2 &= E\phi_2 \end{aligned} \tag{2.17}$$

Après avoir effectué un calcul similaire à celui qui a été fait dans l'équation précédente du FVO, il s'ensuit que

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - m^2\omega^2x^2 + \left(E^2 - m^2 + m\omega\right)\right]\psi(x) = 0 \tag{2.18}$$

ou,

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \lambda_1 x^2 + \lambda_2\right]\psi(x) = 0 \tag{2.19}$$

où nous avons posé,

$$\lambda_1 = m^2\omega^2, \quad \lambda_2 = E^2 - m^2 + m\omega \tag{2.20}$$

L'équation (2.3) est une équation différentielle du second ordre pour le champ ψ décrivant la dynamique du FVO dans l'espace-temps de Minkowski unidimensionnel. La solution de l'équation ci-dessus peut être trouvée dans la littérature, et une condition de quantification de l'énergie résulte de cette solution, donnant

$$\frac{E^2 - m^2 + m\omega}{2m} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\omega, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.21}$$

Après avoir arrangé et simplifié la condition (2.21), nous trouvons l'expression suivante du spectre d'énergie

$$E = \pm\sqrt{2m\omega n + m^2} \tag{2.22}$$

L'équation (2.22) montre le spectre d'énergie relativiste du FVO dans l'espace-temps de Minkowski, qui est le même que celui obtenu pour l'OKG dans l'espace-temps plat (voir Réf. [18]). Nous voyons que ce résultat est attendu car le spectre d'énergie est observable et n'est pas affecté par la représentation que nous avons utilisée.

2.2 Solutions de FV-0 pour le cas de l'atome pionique

L'atome pionique est un système formé par un pion lié à un noyau atomique, où les effets relativistes et quantiques jouent un rôle crucial. Son étude en trois dimensions permet de mieux comprendre les interactions coulombiennes et les corrections relativistes qui influencent ses niveaux d'énergie. Ce modèle est essentiel pour décrire précisément les spectres et les propriétés dynamiques de ces atomes exotiques. Considérons un atome pionique composé d'un noyau de charge $+Ze$ et d'un pion de masse m et de charge $-e$, interagissant par le biais du potentiel coulombien

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \tag{2.23}$$

, où r est la distance entre le noyau et le pion [14].

Soit maintenant l'Hamiltonien à trois dimensions du formalisme de Feshbach-Villars (FV) donné

par :

$$H_{FV0} = (\tau_z + i\tau_y)\left(\frac{p - eA_0}{2m}\right)^2 + m\tau_z + eA_0 \tag{2.24}$$

avec $\mathbf{A} = 0$, $V = eA_0$, et où

$$\tau_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \tau_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_z + \tau_y = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.25}$$

L'Hamiltonien $\mathcal{H}_{FV0}$ s'écrit alors :

$$\mathcal{H}_{FV0} = \frac{1}{2m}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} p^2 + m\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + V\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{p^2}{2m} + m + V & \frac{p^2}{2m} \\ -\frac{p^2}{2m} & -\frac{p^2}{2m} - m + V \end{pmatrix}. \tag{2.26}$$

Ainsi, l'équation propre associée est :

$$\mathcal{H}_{FV0}\Psi = \begin{pmatrix} \frac{p^2}{2m} + m + V & \frac{p^2}{2m} \\ -\frac{p^2}{2m} & -\frac{p^2}{2m} - m + V \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, \tag{2.27}$$

avec

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} \tag{2.28}$$

Le produit matriciel conduit au système d'équations :

$$\left(\frac{p^2}{2m} + m + V\right)\phi_1 + \frac{p^2}{2m}\phi_2 = E\phi_1, \tag{2.29}$$

$$-\frac{p^2}{2m}\phi_1 + \left(-\frac{p^2}{2m} - m + V\right)\phi_2 = E\phi_2. \tag{2.30}$$

En additionnant ces deux équations, on obtient :

$$\left(\frac{p^2}{2m} + m + V\right)(\phi_1 + \phi_2) = E(\phi_1 + \phi_2), \tag{2.31}$$

et en les soustrayant :

$$\frac{p^2}{2m}(\phi_1 + \phi_2) = E(\phi_1 - \phi_2). \tag{2.32}$$

En partant des hypothèses du modèle FV, posons

$$\psi = \phi_1 + \phi_2 \tag{2.33}$$

En définissant l'opérateur

$$iD\psi = i\frac{\partial}{\partial t}\psi - ieA_0\psi = i\frac{\partial}{\partial t}\psi - V\psi = E\psi, \tag{2.34}$$

on a également

$$(E-V)\psi = m(\phi_1 - \phi_2). \tag{2.35}$$

Ainsi,

$$\left(\frac{p^2}{2m} + m\right)\psi = (E-V)(\phi_1 - \phi_2), \tag{2.36}$$

ce qui conduit à

$$\left(\frac{p^2}{2m} + m\right)\psi = (E-V)^2\psi, \tag{2.37}$$

et donc à l'équation différentielle fondamentale :

$$\left(p^2 + m^2 - (E-V)^2\right)\psi = 0. \tag{2.38}$$

Dans les coordonnees spheriques, cette equation devient

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{r^2} + m^2 - E^2 + \frac{EZe^2}{2\pi^2\epsilon_0}\frac{1}{r} - \left(\frac{Ze^2}{4\pi^2\pi^2\epsilon_0}\right)^2\frac{1}{r^2}\right)\psi = 0. \tag{2.39}$$

avec L^2 le carré du moment angulaire orbital et $\widehat{\mathbf{L}} \equiv -i\hbar(\mathbf{r}\times\nabla)$. Comme les harmoniques sphériques $Y_{lm}(\theta,\phi)$ sont des fonctions propres simultanées de $\widehat{\mathbf{L}}^2$ et $\widehat{\mathbf{L}}_z$, les solutions de l'équation sont attendues sous la forme

$$\psi_{E,l,m}(\mathbf{r}) = R_{E,l}(r)\, Y_{lm}(\theta,\phi), \tag{2.40}$$

Ainsi

$$\left[-\frac{1}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) + V\right]\psi_{E,l,m}(\mathbf{r}) = \left(\frac{-m^2+E^2}{2m}\right)\psi_{E,l,m}(\mathbf{r}). \tag{2.41}$$

dont

$$V = -\frac{EZe^2}{2m\pi^2\epsilon_0}\frac{1}{r} - + \left(\frac{Ze^2}{4\pi^2\pi^2\epsilon_0}\right)\frac{1}{2mr^2} \tag{2.42}$$

$$L^2 Y_l^m = l\,(l+1)\,Y_l^m \tag{2.43}$$

où $l = 0, 1, 2, \ldots$ et $m = -l, -l+1, \ldots, l$. En substituant $\psi_{E,l,m}(\mathbf{r})$ dans l'équation (29), on obtient l'équation différentielle radiale suivante :

$$\left[-\frac{1}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{l(l+1)}{2mr^2} - \frac{E}{m}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\frac{1}{r} - \frac{1}{2m}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{r^2}\right]R(r) = \left(\frac{E^2-m^2}{2m}\right)R(r). \tag{2.44}$$

Ici, pour simplifier, on pose $R(r) \equiv R_{E,l}(r)$. On définit $u(r) = rR(r)$ En termes des grandeurs sans

dimension

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}, \quad \lambda \equiv \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{-E^2}{2mc^2\bar{E}}\right)^{1/2} = Z\alpha\left(\frac{-E^2}{2mc^2\bar{E}}\right)^{1/2}, \; \bar{E} = \frac{E^2-m^2}{2m} \tag{2.45}$$

et

$$\varrho \equiv \left(\frac{-8m\bar{E}}{\hbar^2}\right)^{1/2} r, \tag{2.46}$$

l'équation (2.44) devient alors

$$\left[\frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\varrho} - \frac{\beta(\beta+1)}{\varrho^2}\right] u(\varrho) = 0, \tag{2.47}$$

où

$$\beta(\beta+1) = l(l+1) - (Z\alpha)^2 \tag{2.48}$$

En posant

$$u(\varrho) = e^{-\varrho/2}\varrho^{\beta+1} f(\varrho) \tag{2.49}$$

on obtient l'équation différentielle pour $f(\varrho)$:

$$\left[\varrho\frac{d^2}{d\varrho^2} + (2\beta+2-\varrho)\frac{d}{d\varrho} + (\lambda-\beta-1)\right] f(\varrho) = 0. \tag{2.50}$$

Cette équation admet pour solution le polynôme de Laguerre généralisé $L^{2\beta+1}_{\lambda-\beta-1}$, à condition que $n' \equiv \lambda-\beta-1$ soit un entier positif ou nul.

Ainsi, les solutions de l'équation (2.50) sont

$$u(\varrho) \sim e^{-\varrho/2}\varrho^{\beta+1} L^{2\beta+1}_{\lambda-\beta-1}(\varrho). \tag{2.51}$$

En définissant le nombre quantique principal par $n \equiv n' + l + 1$, on obtient $\lambda = n + \beta - l$. Par conséquent, les solutions normalisées de l'équation (2.50) s'écrivent

$$R_{nl}(r) = \left[\frac{Z^3}{a_0^3}\frac{4}{\lambda^4}\left(1+\frac{(Z\alpha)^2}{\lambda^2}\right)^{-3/2}\frac{\Gamma(\lambda-\beta)}{\Gamma(\lambda+\beta+1)}\right]^{1/2} e^{-\varrho/2}\varrho^{\beta} L^{2\beta+1}_{\lambda-\beta-1}(\varrho), \tag{2.52}$$

où $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$, $n = 1, 2, 3, \ldots$, et $l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1)$.

À partir de l'équation (3) et de la définition de λ, les valeurs propres d'énergie des états liés s'obtiennent comme suit :

$$E_{nl} = \pm mc^2\left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n-l-\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-(Z\alpha)^2}\right)^2}\right]^{-1/2} \tag{2.53}$$

Ces valeurs propres d'énergie des états liés sont les mêmes que celles prédites par la théorie de Klein-Gordon. De plus,

$$|\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)|^2\, d^3\mathbf{r} = |R_{nl}(r)|^2 |Y_{lm}(\theta,\phi)|^2\, d^3\mathbf{r} \tag{2.54}$$

représente la probabilité de trouver le pion dans un élément de volume $d^3\mathbf{r}$.

En revanche, la densité de probabilité telle que définie dans la théorie de Klein-Gordon n'est pas positive définie ; elle ne peut donc pas représenter la distribution de probabilité du pionique. Le problème de densité de probabilité négative remet sérieusement en question l'adéquation de l'équation de Klein-Gordon comme équation d'onde pour les particules de spin 0, dans le cadre de l'interprétation mono-particule.

Chapitre 3

Application du formalisme de Schrödinger relativiste

3.1 Potentiel de marche unidimensionnel (step potentiel)

En appliquant une démarche analogue à celle décrite précédemment, l'équation permet de dériver l'équation d'onde décrivant la dynamique du système [3–5, 14, 15, 19, 20] :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\psi\left(r,\tau\right)=\left[\frac{\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}A\right)^{2}}{2m}+V_{eff}\right]\psi\left(r,\tau\right). \tag{3.1}$$

On considère une particule quantique incidente sur une particule quantique incidente sur une discontinuité de potentiel décrite par la forme suivante :

Nous avons :

$$V\left(x\right)=\begin{cases}0, & x<0.\\ V=const, & x>0.\end{cases} \tag{3.2}$$

Cette formulation présente le cas standard d'une particule rencontrant un saut de potentiel abrupt dans le cadre de la mécanique quantique unidimensionnelle. Ici, on distingue trois cas

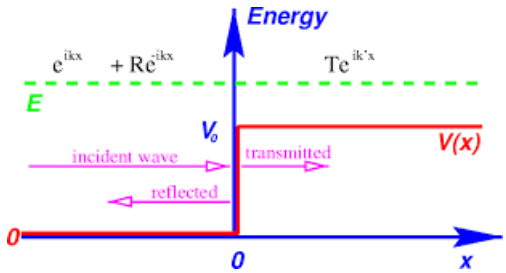


Fig. 3.1: Potentiel de marche unidimensionnel (Step potentiel)

3.1.1 cas ou $V < E - mc^2$.

Dans le domaine $x > 0$, l'énergie cinétique de la particule est strictement positive. L'équation ([eq :145c3]) conduit alors à l'équation stationnaire de propagation ondulatoire. Nous partons de l'équation effective de Schrödinger ([eq :145c3]) décrivant le système quantique sous l'influence d'un potentiel externe :

$$H_{\text{eff}}\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{avec} \quad H_{\text{eff}} = \frac{p^2}{2m} + V_{\text{eff}}. \tag{3.3}$$

On écrit cette équation dans les deux zones distinctes :

- Pour $x < 0$, où $V = 0$, on a :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V_{\text{eff}}(0))\,\psi(x). \tag{3.4}$$

En posant

$$k = \sqrt{\frac{2m\,(E - V_{\text{eff}}(0))}{\hbar^2}}, \tag{3.5}$$

'équation devient

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \tag{3.6}$$

dont les solutions générales sont

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \tag{3.7}$$

- Pour $x > 0$, où $V(x) = V_0$, l'équation est

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V_{\text{eff}}(V_0)\right)\psi(x) = E\psi(x), \tag{3.8}$$

soit, explicitement,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_{\text{eff}}(V_0)\psi(x) = E\psi(x). \tag{3.9}$$

On définit

$$k' = \sqrt{\frac{2m\,(E - V_{\text{eff}}(V_0))}{\hbar^2}}, \tag{3.10}$$

ce qui donne l'équation

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k'^2\psi(x) = 0, \tag{3.11}$$

dont la solution est

$$\psi(x) = Ce^{ik'x}. \tag{3.12}$$

On applique les conditions de continuité au point $x = 0$:

$$\text{Continuité de } \psi : \quad \psi_1(0) = \psi_2(0) \implies A + B = C, \tag{3.13}$$

$$\text{Continuité de } \frac{d\psi}{dx} : \quad \left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0} \implies ik(A - B) = ik'C. \tag{3.14}$$

À partir de ces deux relations, on a :

$$A + B = C, \tag{3.15}$$

$$k(A - B) = k'C. \tag{3.16}$$

En substituant $C = A + B$ dans la deuxième équation, on obtient :

$$k(A - B) = k'(A + B). \tag{3.17}$$

On exprime alors B et C en fonction de A :

$$B = \frac{k - k'}{k + k'}A, \quad C = \frac{2k}{k + k'}A. \tag{3.18}$$

Ainsi, la fonction d'onde s'écrit

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0, \\ Ce^{ik'x}, & x > 0, \end{cases} \tag{3.19}$$

où A, B, C sont des constantes d'intégration. La nature incidente de la particule venant du domaine $x \leq 0$ implique qu'il n'y ait pas de terme exponentiel décroissant dans la région $x \geq 0$.

Pour l'étude de la densité de courant de probabilité J, la substitution de la fonction d'onde dans l'expression donne :

$$J = \begin{cases} \dfrac{\hbar k}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right), & x < 0, \\ \dfrac{\hbar k'}{m}|C|^2, & x > 0. \end{cases} \tag{3.20}$$

Calcul détaillé dans la région $x < 0$:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \frac{d\psi}{dx} = ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}, \tag{3.21}$$

$$\psi^* = A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx}, \tag{3.22}$$

$$\psi^*\frac{d\psi}{dx} = ik|A|^2 - ikA^*Be^{-2ikx} + ikB^*Ae^{2ikx} - ik|B|^2. \tag{3.23}$$

En prenant la partie imaginaire,

$$\text{Im}\left(\psi^*\frac{d\psi}{dx}\right) = k(|A|^2 - |B|^2), \tag{3.24}$$

d'où

$$J = \frac{\hbar}{m} k(|A|^2 - |B|^2). \tag{3.25}$$

Dans la région $x > 0$:

$$\psi(x) = Ce^{ik'x}, \quad \frac{d\psi}{dx} = ik'Ce^{ik'x}, \tag{3.26}$$

$$\psi^* \frac{d\psi}{dx} = ik'|C|^2, \tag{3.27}$$

et donc

$$J = \frac{\hbar}{m} k'|C|^2. \tag{3.28}$$

La condition de continuité du courant en $x = 0$ impose :

$$J_{x<0} = J_{x>0} \implies \frac{\hbar k}{m} \left(|A|^2 - |B|^2\right) = \frac{\hbar k'}{m}|C|^2, \tag{3.29}$$

ou, simplifiée,

$$k \left(|A|^2 - |B|^2\right) = k'|C|^2. \tag{3.30}$$

En divisant par $|A|^2$,

$$k \left(1 - \frac{|B|^2}{|A|^2}\right) = k' \frac{|C|^2}{|A|^2}. \tag{3.31}$$

On obtient donc la relation fondamentale exprimant la conservation du flux de probabilité.

Le coefficient de réflexion R est défini par

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)^2. \tag{3.32}$$

En posant

$$k = \frac{\sqrt{E^2 - m^2c^4}}{\hbar c}, \quad k' = \frac{\sqrt{(E - V)^2 - m^2c^4}}{\hbar c}, \tag{3.33}$$

on obtient explicitement

$$R = \frac{\left(\sqrt{E^2 - m^2c^4} - \sqrt{(E - V)^2 - m^2c^4}\right)^2}{\left(\sqrt{E^2 - m^2c^4} + \sqrt{(E - V)^2 - m^2c^4}\right)^2}. \tag{3.34}$$

Le coefficient de transmission s'écrit

$$T = \frac{k'}{k} \left|\frac{C}{A}\right|^2. \tag{3.35}$$

En utilisant

$$\frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'}, \tag{3.36}$$

on obtient

$$T = \frac{k'}{k}\left(\frac{2k}{k+k'}\right)^2 = \frac{4kk'}{(k+k')^2} = \frac{4\sqrt{(E^2-m^2c^4)((E-V)^2-m^2c^4)}}{\left(\sqrt{E^2-m^2c^4}+\sqrt{(E-V)^2-m^2c^4}\right)^2}. \tag{3.37}$$

'analyse systématique montre, conformément aux principes fondamentaux de la mécanique quantique, la conservation du flux de probabilité :

$$R + T = 1. \tag{3.38}$$

En mécanique quantique, cette égalité représente la conservation de la probabilité dans un phénomène de diffusion ou de transmission d'une particule (comme un électron) face à une barrière ou un potentiel. Ici,

- R est le coefficient de réflexion : la probabilité que la particule incidente soit réfléchie par la barrière.
- T est le coefficient de transmission : la probabilité que la particule traverse la barrière (soit transmise).

Comme la particule doit soit être réfléchie, soit être transmise (dans le cas d'un système sans perte ni absorption), la somme des probabilités doit être égale à 1, c'est-à-dire à 100 % :

$$\boxed{R + T = 1} \tag{3.39}$$

Cela traduit la conservation du flux de probabilité, un principe fondamental de la mécanique quantique lié à la conservation de la charge et de la matière.

En termes physiques

- Le flux de probabilité est analogue au flux d'une quantité conservée (par exemple, l'intensité d'un courant).
- L'égalité garantit que la particule n'est ni créée ni détruite pendant la diffusion ou la transmission.
- Elle est essentielle pour que la description quantique soit cohérente et conserve la norme de la fonction d'onde.

3.1.2 cas ou $E - mc^2 < V < E + mc^2$.

- Dans la région $x \leq 0$, l'énergie cinétique de la particule est négative mais reste supérieure à $2mc^2$. Par conséquent, l'équation du mouvement s'écrit :

$$R + T = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 + \frac{4kk'}{(k+k')^2} = \frac{k^2 - 2kk' + k'^2 + 4kk'}{(k+k')^2}. \tag{3.40}$$

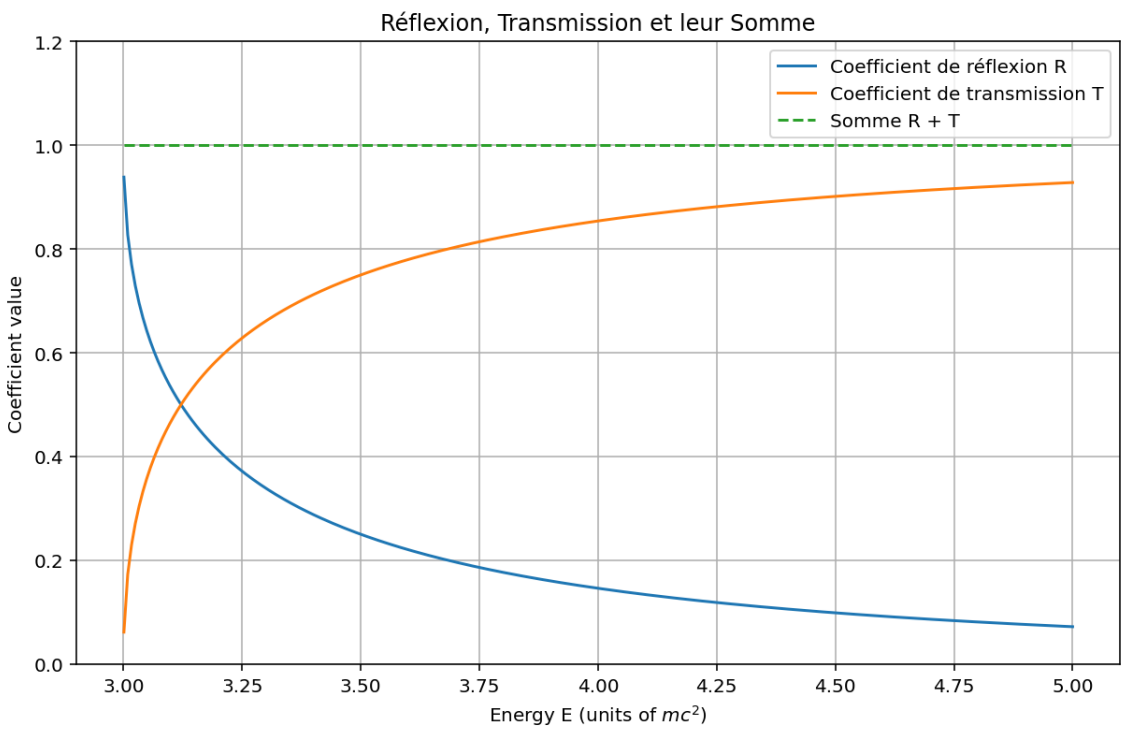


Fig. 3.2: Coefficients de réflexion R, de transmission T et leur somme en fonction de l'énergie, avec un potentiel $V_0 = 2$.

Pour $-mc^2 < E - V < mc^2$, avec

$$\begin{cases} V_{\text{eff}} = 0 & \text{pour } x > 0, \\ V_{\text{eff}} = V_0 & \text{pour } x < 0, \end{cases} \tag{3.41}$$

l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{eff}}(x) \right] \psi(x) = E\psi(x). \tag{3.42}$$

- Résolution dans la région $x \geq 0$ où $V_{\text{eff}} = 0$: on a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x), \tag{3.43}$$

ce qui donne

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0. \tag{3.44}$$

Lorsque E est négative, on pose

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \tag{3.45}$$

donnant l'équation

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \tag{3.46}$$

avec

$$k = \left(\frac{2mH_{\text{eff}}}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \quad \text{pour } x < 0. \tag{3.47}$$

La solution générale est une combinaison exponentielle représentant les ondes incidente et réfléchie :

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \tag{3.48}$$

- Résolution dans la région $x < 0$, avec $V_{\text{eff}} = V_0$ et $E < V_0$: L'équation de Schrödinger est

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x), \tag{3.49}$$

que l'on réarrange en

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi(x) = 0. \tag{3.50}$$

On pose

$$\bar{k} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}, \tag{3.51}$$

donnant l'équation canonique

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \bar{k}^2\psi(x) = 0, \quad \text{pour } x > 0. \tag{3.52}$$

La solution est

$$\psi(x) = De^{-\bar{k}x}. \tag{3.53}$$

- Conditions de continuité au point $x = 0$:Continuité de la fonction d'onde donne

$$\psi(0^-) = \psi(0^+) \implies A + B = D. \tag{3.54}$$

Continuité de la dérivée :

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{0^-} = \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{0^+} \implies ik(A - B) = -\bar{k}D. \tag{3.55}$$

La fonction d'onde complète s'écrit alors

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0, \\ De^{-\bar{k}x}, & x > 0, \end{cases} \tag{3.56}$$

avec

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \bar{k} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \tag{3.57}$$

La solution exponentielle croissante $e^{\bar{k}x}$ est éliminée pour $x > 0$ afin d'assurer la normalisabilité de la

fonction d'onde. L'application des conditions de continuité conduit au système d'équations :

$$\begin{cases} A + B = D, \\ ik(A - B) = -\bar{k}D, \end{cases} \tag{3.58}$$

dont la résolution analytique donne les rapports d'amplitude :

$$\frac{B}{A} = \frac{1 - i\frac{k}{\bar{k}}}{1 + i\frac{k}{\bar{k}}} \equiv e^{i\alpha}, \tag{3.59}$$

et

$$\frac{D}{A} = \frac{2}{1 + i\frac{k}{\bar{k}}}, \tag{3.60}$$

avec la phase

$$\alpha = 2\tan^{-1}\left(-\frac{k}{\bar{k}}\right). \tag{3.61}$$

Cette analyse démontre que le coefficient de réflexion

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1, \tag{3.62}$$

conforme aux principes de la mécanique quantique, correspond à une réflexion totale des particules incidents sur la barrière lorsque $E < V_0$.

3.1.3 cas ou $V > E + mc^2$.

Dans cette configuration spécifique, l'analyse montre que l'énergie cinétique de la particule dans la région $x < 0$ est inférieure au seuil critique de $-2mc^2$. Le formalisme hamiltonien appliqué à ce système indique que la condition

$$H_{\text{eff}} - V_{\text{eff}} < 0 \tag{3.63}$$

est satisfaite, ce qui implique que la dynamique du système est gouvernée par l'équation (3.39) établie précédemment pour le cas 1.

Il en résulte que les coefficients de réflexion R et de transmission T, respectivement définis par les équations (3.30) et 3.37) dans le cas 1, vérifient les contraintes suivantes :

$$0 \leq R \leq 1, \quad 0 \leq T \leq 1, \tag{3.64}$$

ainsi que la relation de conservation fondamentale

$$R + T = 1. \tag{3.65}$$

Une étude comparative approfondie établit une parfaite cohérence de ces résultats avec les prédictions fondamentales de la théorie de Klein-Gordon, à condition d'adopter une convention de signe positive pour l'impulsion p dans la relation relativiste

$$p^2c^4 = (E - V)^2 - m^2c^4 \tag{3.66}$$

En revanche, l'adoption d'une impulsion négative conduit la théorie de Klein-Gordon, dans cette configuration particulière (Cas 3), à prédire des valeurs extrêmes :

$$R = 1 \quad \text{et} \quad T = 0, \tag{3.67}$$

ce qui constitue une manifestation directe du célèbre paradoxe de Klein. Le paradoxe de Klein met en lumière une propriété non triviale des équations relativistes : lorsqu'une particule fait face à une barrière de potentiel très élevée (supérieure à $2mc^2$), la probabilité de transmission peut devenir non nulle, voire totale, ce qui contredit la mécanique classique où la barrière serait insurmontable. Cette contre-intuition suggère l'apparition d'effets liés à la création de paires particule-antiparticule à l'interface du potentiel, phénomène inhérent à la physique quantique relativiste.

Malgré son importance théorique, ce paradoxe n'a pas encore été confirmé de manière concluante par des expériences. Les conditions nécessaires, notamment l'existence de potentiels extrêmement intenses et les effets relativistes précis, rendent sa validation expérimentale très délicate à réaliser à ce jour.

3.2 Les solutions propres de l'atome pionique

Considérons un système atomique pionique constitué d'un noyau de charge $+Ze$ et d'un pion chargé négativement π^- de masse m, interagissant via un potentiel coulombien attractif donné par

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}, \tag{3.68}$$

où r désigne la distance entre le noyau et le pion. L'équation stationnaire décrivant cet état lié s'écrit sous la forme générale

$$\hat{H}_{\text{eff}}\psi(\mathbf{r}) = \left(\sqrt{-\hbar^2c^2\nabla^2 + m^2c^4} + V_{\text{eff}}(r)\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \tag{3.69}$$

avec ∇^2 l'opérateur Laplacien.

En coordonnées sphériques, le Laplacien prend la forme [3–5]

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}. \tag{3.70}$$

Ce dernier peut aussi s'écrire sous la forme

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}, \tag{3.71}$$

où $\hat{L}^2$ est l'opérateur du carré du moment angulaire orbital, défini par

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right]. \tag{3.72}$$

La fonction d'onde est supposée séparable selon la forme

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\phi), \tag{3.73}$$

où $Y_{lm}(\theta,\phi)$ sont les harmoniques sphériques, vecteurs propres de $\hat{L}^2$ avec

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}, \quad l = 0,1,2,\ldots, \quad m = -l,\ldots,l. \tag{3.74}$$

En appliquant la séparation des variables, l'équation radiale devient

$$\left[\sqrt{-\hbar^2 c^2 \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + m^2c^4} + V_{\text{eff}}(r) \right] R(r) = ER(r). \tag{3.75}$$

Pour simplifier l'opérateur racine, on applique une approximation valide dans les régimes relativistes et non relativistes :

$$\sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4} \approx mc^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\nabla^4 + \cdots. \tag{3.76}$$

La substitution explicite de V_{eff} s'effectue via

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{E}{mc^2}V(r) + \frac{V^2(r)}{2mc^2} = -\frac{EZe^2}{mc^2 4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{Z^2e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2 mc^2 r^2}. \tag{3.77}$$

L'équation radiale complète en coordonnées sphériques s'écrit alors

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{EZe^2}{mc^2 4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{Z^2e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2 mc^2 r^2} \right] R(r) = (E - mc^2)R(r). \tag{3.78}$$

En posant la fonction $u(r) = rR(r)$, et en introduisant la variable adimensionnelle

$$\varrho = \left(\frac{-8mH_{\text{eff}}}{\hbar^2} \right)^{1/2} r, \quad \text{avec} \quad H_{\text{eff}} = V_{\text{eff}} + mc^2 - E, \tag{3.79}$$

ainsi que les constantes

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \quad \text{(constante de structure fine)}, \quad \lambda = Z\alpha \left(\frac{-E^2}{2mc^2 H_{\text{eff}}} \right)^{1/2}, \tag{3.80}$$

l'équation radiale se réduit à la forme standard [21–24]

$$\frac{d^2u}{d\varrho^2}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{\lambda}{2\varrho}-\frac{l(l+1)-(Z\alpha)^2}{\varrho^2}\right]u=0. \tag{3.81}$$

Ici, la constante de structure fine, notée α, est une constante fondamentale de la physique. Elle caractérise l'intensité de l'interaction électromagnétique entre particules chargées, sans dimension, et joue un rôle clé dans la structure fine des raies spectrales atomiques.

En définissant

$$\beta(\beta+1)=l(l+1)-(Z\alpha)^2, \tag{3.82}$$

la fonction $u(\varrho)$ peut s'écrire sous la forme

$$u(\varrho)=e^{-\varrho/2}\varrho^{\beta+1}f(\varrho), \tag{3.83}$$

où $f(\varrho)$ satisfait l'équation différentielle de Laguerre généralisée

$$\varrho\frac{d^2f}{d\varrho^2}+[2(\beta+1)-\varrho]\frac{df}{d\varrho}+\left(\frac{\lambda}{2}-\beta-1\right)f=0. \tag{3.84}$$

La condition de quantification est que $n'\equiv\lambda-\beta-1$ soit un entier naturel, ce qui donne pour les solutions normalisées

$$u(\varrho)=Ae^{-\varrho/2}\varrho^{\beta+1}L_{n'}^{2\beta+1}(\varrho), \tag{3.85}$$

avec $L_{n'}^{k}$ les polynômes de Laguerre généralisés. Le nombre quantique principal s'écrit

$$n=n_r+\beta+1, \tag{3.86}$$

et l'énergie associée aux états liés s'exprime sous la forme relativiste

$$E_{nl}=mc^2\left[1+\frac{(Z\alpha)^2}{\left(n_r+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-(Z\alpha)^2}\right)^2}\right]^{-1/2}. \tag{3.87}$$

Les coefficients de normalisation A sont déterminés par la condition

$$\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2r^2dr=1, \tag{3.88}$$

en utilisant l'orthogonalité des polynômes de Laguerre.

Dans la limite non relativiste, on obtient

$$\beta\approx l,\quad n\approx n_r+l+1, \tag{3.89}$$

et les fonctions d'onde radiales deviennent

$$R_{nl}(r) = Ae^{-\lambda r/2}(\lambda r)^{\beta} L_{n-\beta-1}^{2\beta+1}(\lambda r). \tag{3.90}$$

Le spectre d'énergie ainsi obtenu coïncide exactement avec les prédictions de la théorie de Klein-Gordon [1, 2]. Cependant, la théorie de Klein-Gordon souffre d'une densité de probabilité non positive définie, ce qui rend son interprétation physique en termes de probabilité problématique. Ce défaut conceptuel questionne la validité de l'équation de Klein-Gordon comme description ondulatoire cohérente des particules à spin nul.

Ces résultats illustrent que des méthodes issues de la mécanique quantique non relativiste peuvent être exploitées efficacement pour résoudre certains problèmes relativistes, en particulier par le biais d'approximations appropriées.

3.3 L'oscillateur de Schrödinger relativiste

3.3.1 L'oscillateur de Klein-Gordon

L'équation de mouvement libre de Klein-Gordon (K-G) en une dimension spatiale s'écrit :

$$\left(p_x^2 - E^2 + m^2\right)\psi_{KG} = 0. \tag{3.91}$$

L'introduction d'une interaction de type oscillateur de Dirac se fait par la substitution de l'opérateur impulsion

$$p_x \to p_x - im\omega x. \tag{3.92}$$

Ainsi, l'équation devient [10, 18, 25–47]

$$\left((p_x + im\omega x)(p_x - im\omega x)\right)\psi_{KG} = (E^2 - m^2)\psi_{KG}. \tag{3.93}$$

En utilisant la relation canonique de commutation $[x, p_x] = i$, un calcul élémentaire conduit à

$$\left(p_x^2 + m^2\omega^2 x^2\right)\psi_{KG} = \left(E^2 - m^2 + m\omega\right)\psi_{KG}. \tag{3.94}$$

En divisant par $2m$ et en posant

$$\bar{E} = \frac{E^2 - m^2}{2m} + \frac{\omega}{2}, \tag{3.95}$$

on obtient la forme canonique

$$\left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi_{KG} = \bar{E}\psi_{KG}. \tag{3.96}$$

Cette équation constitue une généralisation non triviale de l'oscillateur harmonique quantique unidimensionnel standard. Par analogie avec ses solutions bien connues, les valeurs propres s'écrivent

$$\bar{E} = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \tag{3.97}$$

d'où le spectre d'énergie relativiste

$$E_n = \pm\sqrt{m^2 + 2\omega m n}. \tag{3.98}$$

La fonction d'onde stationnaire correspondante s'exprime sous la forme

$$\psi_{KG}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} H_n \left(\sqrt{m\omega} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2} x^2}, \tag{3.99}$$

où H_n sont les polynômes d'Hermite [3, 6].

3.3.2 L'oscillateur de Schrödinger relativiste

On considère l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \psi(x,\tau) = \left[\frac{p^2}{2m} + V_{\text{eff}} \right] \psi(x,\tau), \tag{3.100}$$

avec

$$V_{\text{eff}} = \frac{2EV - V^2}{2mc^2}. \tag{3.101}$$

L'interaction de type oscillateur de Dirac est introduite par la substitution $p_x \to p_x - im\omega x$, transformant l'équation en

$$i \frac{\partial}{\partial \tau} \psi(x,\tau) = \frac{(p_x + im\omega x)(p_x - im\omega x)}{2m} \psi(x,\tau). \tag{3.102}$$

Pour $V = 0$, on a

$$(p_x + im\omega x)(p_x - im\omega x) = p_x^2 + m^2\omega^2 x^2 - m\omega. \tag{3.103}$$

Dès lors,

$$H_{\text{eff}} \phi(x) = \left[\frac{p_x^2 + m^2\omega^2 x^2 - m\omega}{2m} \right] \phi(x), \tag{3.104}$$

où

$$\psi(x,\tau) = e^{-iH_{\text{eff}}\tau} \phi(x) \tag{3.105}$$

avec

$$H_{\text{eff}} = \frac{E^2 - m^2c^4}{2mc^2}. \tag{3.106}$$

Cette dernière équation correspond à l'oscillateur harmonique quantique standard

$$\left(\frac{p_x^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\phi(x)=\epsilon\phi(x), \tag{3.107}$$

avec

$$\epsilon=\frac{E^2-m^2c^4}{2mc^2}+\frac{\omega}{2}=\omega\left(n+\frac{1}{2}\right). \tag{3.108}$$

On obtient alors le spectre d'énergie

$$E_n=\pm\sqrt{m^2c^4+2\omega mc^2n}, \tag{3.109}$$

et la fonction d'onde

$$\phi(x)=\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}H_n\left(\sqrt{m\omega}x\right)e^{-\frac{m\omega}{2}x^2}. \tag{3.110}$$

3.4 Comparaison technique entre l'oscillateur de Klein-Gordon et l'oscillateur de Schrödinger relativiste

L'équation de Klein-Gordon est une équation fondamentale relativiste du second ordre en temps, décrivant des particules scalaires de spin nul. Elle s'écrit sous la forme

$$\left(\hat{p}^\mu\hat{p}_\mu-m^2c^2\right)\psi=0, \tag{3.111}$$

où $\hat{p}^\mu$ représente l'opérateur quadrivecteur impulsion-énergie.

En revanche, le formalisme de la Schrödinger relativiste reformule cette équation de Klein-Gordon comme une équation de Schrödinger avec un hamiltonien effectif qui intègre les corrections relativistes.

L'oscillateur de Klein-Gordon est obtenu par une substitution directe sur l'opérateur impulsion, $p_x\to p_x-im\omega x$, transformant l'équation initiale en une forme comportant des termes quadratiques en x et p_x. Cette substitution préserve la nature intrinsèquement relativiste de l'équation. Dans ce cadre, l'interaction est introduite dans l'hamiltonien effectif par la même substitution, mais la nouvelle équation prend la forme d'une équation de Schrödinger standard avec un potentiel harmonique modifié, où l'énergie relativiste est incorporée de manière effective dans les paramètres.

Concernant l'oscillateur de Klein-Gordon, il s'agit d'une équation aux dérivées partielles du second ordre en temps, qui soulève des difficultés conceptuelles, notamment sur la définition de la densité de probabilité et l'existence de solutions à énergie négative. Les solutions exactes fournissent un spectre d'énergie relativiste présentant une structure riche et complexe.

À l'inverse, l'oscillateur de Schrödinger relativiste correspond à une équation de Schrödinger unitaire du premier ordre en temps, avec un hamiltonien modifié. Cette formulation permet d'appliquer directement les outils classiques de la mécanique quantique non relativiste — telles que les fonctions

d'onde, la quantification et l'orthogonalité — tout en incorporant les corrections relativistes essentielles au spectre énergétique.

La théorie de Klein-Gordon est pleinement relativiste, mais présente des ambiguïtés physiques, en particulier dans l'interprétation quantique de la probabilité. Elle décrit fidèlement les particules scalaires, mais requiert souvent un formalisme de champ quantique pour une interprétation complète.

En revanche, l'équation de Schrödinger relativiste constitue une approche plus pragmatique, adaptée aux situations où les effets relativistes sont non négligeables tout en conservant une interprétation probabiliste standard. Elle facilite l'analyse spectrale et la modélisation d'interactions complexes dans un cadre quantique effectif.

En conclusion, l'oscillateur de Klein-Gordon offre une approche rigoureuse et fondamentale, mais formellement plus abstraite et complexe, tandis que l'oscillateur de Schrödinger relativiste propose une méthode plus accessible et intuitive, particulièrement adaptée à l'étude des systèmes relativistes sous approximations effectives. Le choix entre ces deux approches dépend du contexte physique et du degré de précision souhaité.

Conclusion

Dans ce mémoire, l'étude de l'oscillateur de Feshbach-Villars FV-0 pour une particule bosonique unidimensionnelle s'appuie principalement sur la reformulation de l'équation de Klein-Gordon (KG) selon deux approches complémentaires : le formalisme de Feshbach-Villars (FV) et une approche alternative de type Schrödinger pour les particules de spin zéro en théorie quantique relativiste.

Après avoir exposé la formulation standard de l'équation de Klein-Gordon et son reformulation à deux composantes via le formalisme FV, le mémoire introduit un second cadre : une équation d'onde de type Schrödinger adaptée à la dynamique relativiste des particules de spin zéro.

Cette approche s'inspire de la structure de l'équation de Schrödinger non relativiste, mais en y intégrant les corrections relativistes issues de la relation énergie-impulsion :

$$E^2 - p^2c^2 = m^2c^4 \tag{3.112}$$

En isolant l'énergie, on définit un Hamiltonien effectif :

$$H_{eff} = \frac{p^2}{2m} + V_{eff} \tag{3.113}$$

avec

$$V_{eff} = \frac{2EV - V^2}{2mc^2} \tag{3.114}$$

L'équation d'onde correspondante, pour une particule dans un potentiel $V(r)$, devient alors :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\psi(r,\tau) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{eff}\right]\psi(r,\tau) \tag{3.115}$$

où τ est le temps propre, lié au temps coordonné par $dt = \gamma d\tau$, et γ est le facteur de Lorentz. Cette équation admet une densité de probabilité positive et conserve la structure de l'équation de continuité, ce qui facilite son interprétation physique. Cette formulation permet d'aborder des problèmes classiques de la mécanique quantique relativiste, tels que le potentiel de marche unidimensionnel, l'atome pionique et l'oscillateur harmonique relativiste, en utilisant des méthodes familières de la mécanique quantique non relativiste, mais adaptées au contexte relativiste.

Pour l'oscillateur de Klein-Gordon, l'équation de type Schrödinger permet de retrouver le spectre

d'énergie relativiste :

$$E_n = \pm\sqrt{m^2 + 2\omega mn} \tag{3.116}$$

et les fonctions d'onde associées, qui conservent la forme générale des solutions de l'oscillateur quantique standard, mais avec des corrections relativistes explicites.

L'équation de type Schrödinger relativiste permet d'obtenir les niveaux d'énergie liés du pion dans un champ coulombien, avec une densité de probabilité bien définie et positive, contrairement à la densité parfois négative de la théorie KG standard. Le formalisme de type Schrödinger offre une densité de probabilité toujours positive, ce qui facilite son interprétation probabiliste et évite les difficultés rencontrées dans la théorie de Klein-Gordon standard.

Les spectres d'énergie obtenus par cette approche coïncident avec ceux issus du formalisme FV et de la théorie de Klein-Gordon, ce qui valide la robustesse de la méthode.

Toutefois, cette approche ne permet pas de séparer explicitement les composantes particule et antiparticule comme le fait le formalisme FV. Elle est donc moins adaptée à l'analyse des phénomènes où la distinction entre états à énergie positive et négative est essentielle (par exemple, la création de paires).

L'intégration de la deuxième approche, de type Schrödinger, enrichit considérablement l'analyse du mémoire. Elle permet d'aborder la dynamique quantique relativiste des particules de spin zéro avec des outils alternatifs, tout en validant la cohérence des résultats obtenus via le formalisme FV. Cette complémentarité offre une vision globale et nuancée des différentes formulations de l'équation de Klein-Gordon, leurs avantages respectifs et leurs domaines d'application privilégiés. Les deux exemples précédents illustrent que le formalisme alternatif exploite des techniques familières de la mécanique quantique non relativiste pour résoudre des problèmes quantiques relativistes.

Ainsi, la prise en compte de cette deuxième approche permet d'assurer la solidité des conclusions du mémoire et d'ouvrir la voie à l'utilisation de méthodes hybrides pour l'étude de systèmes quantiques relativistes complexes.

Bibliographie

[1] O. Klein, *Zeitschrift f .ur Physik* **1926**, 37, 895–906.

[2] O. Klein, *Z. Phys* **1929**, 53, 157.

[3] W. Greiner, *Relativistic quntum mechanics,,* **1990.**

[4] W. Greiner, L. Neise, H. Stocker, *Thermodynamique et mécanique statistique*, Springer, **1995**.

[5] W. Greiner, *Relativistic quantum mechanics wave equations*, Springer-Verlag Berlin, **2000**.

[6] W. Greiner, *Quantum Mechanics* : *An Introduction*, S. V. 4th ed (Ed.), Spinger-Verlag, Berlin., **2001**.

[7] H. S. W. Greiner, L. Neise, *Thermodynamique et mécanique statistique*, Springer, **1995**.

[8] H. Feshbach, H. Villars, *Rev. Modern Phys.* **1958**, 30, 24–45.

[9] A. Hamla, mathesis, Université de Tébessa, **2024**.

[10] A. Boumali, A.Hamla, Y.Chargui, *Int. J. Theor. Phys.* **2024**, 63.

[11] A. Bounames, L. Chetouani, *Phys. Lett. A* **2001**, 279, 139–150.

[12] A. Bouzenada, A. Boumali, *Ann. Physics* **2023**, 452, 169302.

[13] A. Boumali, R. Allouani, A. Bouzenada, F. Serdouk, *Ukr. J. Phys.* **2023**, 68, 235.

[14] Y. S. Huang, *Phys. Lett. A* **1996**, 219, 145–149.

[15] Y. S. Huang, *Il Nuovo Cimento B* **1997**, 112, 75.

[16] Y. S. Huang, *Found. Phys.* **2001**, 31, 1287.

[17] A.Bill, Master's thesis, California State University,, **2020**.

[18] A. Boumali, *EJTP.* **2015**, 12, 121–130.

[19] Z. Huang, H. Zhimin, *Quantum. Inf. Process.* **2020**, 19, 298.

[20] M. W. Robert, *Green's function solution to relativistic Feshbach-Villars wave equations for spin zero particles*, California State University, Long Beach, **2012**.

[21] G. Andrews, R. Askey, R. Roy, *Special functions*, Cambridge : Cambridge University Press, **1999**.

[22] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York, **1965**.

[23] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*, *Vol.* 55, Dover Publications, New York, **1970**.

[24] G. E. Andrews, R. Askey, R. Roy, *Special Functions*, Cambridge University Press, **2001**.

[25] A. Boumali, *Phys. Scr* **2015**, 90, 045702.

[26] A.Boumali, F.Serdouk, S.Dilmi, *Phys. A.* **2020**, 533, 124207.

[27] A.Boumali, H.Aounallah, *Rev. Mex. Fis.* **2020**, 66, 192–208.

[28] A. Boumali, *Mécanique quantique* (*en arabe*), open source (researshgate ; academia) (Ed.), Boumali, **2019**.

[29] A. Boumali, L. Chetouani, *PhysicLetters A* **2005**, 346, 261–268.

[30] A. Boumali, *Solutions de l'Equation de Duffin-Kemmer-Petiau* (*DKP*) *pour certaines formes d'interactions*, U. of Annaba (Ed.), Department of physics, **2006**.

[31] A. Boumali, *Turk. J. Phys.* **2007**, 31, 307–316, 307.

[32] A. Boumali, *J. Phys. A* : *Math. Theor.* **2009**, 42, 235301, 235301.

[33] A. Boumali, A. Hafdallah, A. Toumi, *Phys. Scr* **2011**, 84, 1–2, 669.

[34] A. Boumali, H. Hassanabadi, *Eur Phys. J Plus.* **2013**, 128, 124.

[35] A. Boumali, L. Chetouani, H. Hassanabadi, *Can. J. Phys.* **2013**, 91, 1–11.

[36] A. Boumali, N. Messai, *Can. J. Phys* **2014**, 92, 1460–1463.

[37] A. Boumali, *Z. Naturf. a* **2015**, 70, 867–874.

[38] A. Boumali, H. Hassanabadi, *Z. Naturforsch.* **2015**, 70, 619–627.

[39] A. Boumali, *Phys.Scr.* **2015**, 90, 045702.

[40] A. Boumali, H. Hassanabadi, *Adv. High Energy Phys.* **2017**, 2017, 1–12.

[41] A. Boumali, S. Dilmi, S. Zare, H. Hassanabadi, *K. Int. J. Mod. Sci* **2017**, 3, 1201.

[42] A. Boumali, H. Aounallah, *Adv. High Energy Phys.* **2018**, 2018, 9.

[43] A. Boumali, L. Malika, *Modern Phys. Lett. A* **2018**, 33, 1850033.

[44] A. Boumali, *J. Math. Chem* **2018**, 56, 1656–1666.

[45] A. Boumali, Z. Selama, *Phys. Part. Nuclei Lett* **2018**, 15, 473–477.

[46] A. Boumali, M. Labidi, *J. Low. Temp. Phys* **2021**, 203, 10909–021–02596–6.

[47] A. Boumali, T. I. Rouabhia, *Phys. Lett. A* **2021**, 385, 126985.