

Mécanique Quantique II

Cours de troisième année ¹

Ruth Durrer

Département de Physique Théorique de l'Université de Genève
Quai E. Ansermet 24, 1211 Genève 4, Suisse

Manuscrit rédigé par **Cyril Cartier**

2004 – 2005



¹Version : 11 novembre 2008

Table des matières

1	Symétries, moment cinétique et spin	4
1.1	Invariance sous rotation et moment cinétique pour des particules sans spin ($s = 0$)	5
1.2	Les représentations irréductibles du groupe des rotations	8
1.2.1	Les harmoniques sphériques	10
1.3	Automorphismes de Wigner et représentations projectives	14
1.4	Le groupe $SU(2)$ comme recouvrement universel de $SO(3)$	16
1.5	Série de Clebsch-Gordan et le caractère d'une représentation	20
1.5.1	Preuve intuitive du théorème de Clebsch-Gordan	20
1.5.2	Le caractère	22
1.5.3	Décomposition en représentations irréductibles et addition de moments cinétiques	26
1.6	Particules avec spin, l'équation de Pauli	26
2	Théorie des perturbations	31
2.1	Perturbations stationnaires	32
2.2	Applications	35
2.2.1	Atome d'hélium : état fondamental	36
2.2.2	Atome d'hydrogène : effet Stark	38
2.2.3	Atome d'hydrogène : couplage spin-orbite et effet Zeemann	39
2.2.4	Para-hélium et ortho-hélium	45
2.2.5	Atome d'hydrogène : structure hyperfine	48
2.3	Théorie des perturbations avec dépendance temporelle	52
2.3.1	Formalisme	52
2.3.2	Amplitudes de transition	58
2.3.3	Perturbations statiques	59
2.3.4	L'approximation adiabatique	60
2.3.5	Autres méthodes d'approximation	62
3	Théorie de la diffusion	67
3.1	Diffusion stationnaire par un potentiel	68
3.1.1	La section efficace	69
3.1.2	Etats stationnaires de diffusion	70
3.2	Applications	72
3.2.1	La diffusion d'un électron par un atome neutre	72
3.2.2	Le potentiel de Yukawa	74
3.3	Les opérateurs de Møller Ω_{\pm} et la matrice S	75
3.3.1	Calcul perturbatif de la matrice S	79

3.3.2	Amplitude de diffusion et section efficace	81
3.3.3	Le théorème optique	83
3.3.4	Les équations de Lippmann et Schwinger ($\hbar = 1$)	84
3.3.5	Décomposition partielle de l'onde diffusée	88
3.3.6	Le théorème optique (bis)	91
3.3.7	Résonances	92
4	La théorie de Dirac	94
4.1	Rappel sur le groupe de Lorentz	96
4.2	Le groupe de Lorentz de la mécanique quantique	99
4.3	Les représentations de dimension finie de $SL(2, \mathbb{C})$, le calcul des spineurs	103
4.3.1	Irréductibilité et complétude des rep. $\mathcal{D}(\frac{n}{2}, \frac{m}{2})$	108
4.3.2	Représentations de \mathcal{L}^\dagger	113
4.4	Champs de spineurs et équations de champs covariantes	115
4.4.1	Opérateurs de différentiation	116
4.4.2	Equations de champs covariantes	117
4.5	Algèbre de Dirac-Clifford, les termes covariants bi-linéaires	123
4.5.1	Algèbre de Dirac-Clifford	123
4.5.2	Les combinaisons bi-linéaires	127
4.6	L'équation de Dirac en présence d'un champ électromagnétique	129
4.6.1	Transformations de jauge	130
4.6.2	Equation de 2 ^{ème} ordre	130
4.7	Limite non-relativiste de l'équation de Dirac	131
4.7.1	Une équation de Schrödinger	131
4.7.2	Le facteur gyromagnétique : $\mathcal{O}(\frac{v}{c})$	132
4.7.3	Le couplage spin-orbite : $\mathcal{O}(\frac{v}{c})^2$	133
4.8	La structure fine de l'atome d'hydrogène	136
4.9	Solutions de l'équation de Dirac libre	137
4.9.1	Ondes planes	138
4.9.2	Ondes sphériques de diffusion	140
4.10	Le problème des solutions à énergie négative et la conjugaison de charge	146
	Annexe	149
A.1	Notation spectroscopique	149
A.2	Matrices de Pauli	150
A.3	Deux solutions de l'équation de Schrödinger	151
A.3.1	Les états principaux de l'atome d'hydrogène	151
A.3.2	L'oscillateur harmonique	152
A.4	Matrices de Dirac	153
A.4.1	Propriétés générales	153
A.4.2	Représentation (chirale) de Weyl	154
A.4.3	Représentation de Dirac-Pauli	155
	Bibliographie	156

Chapitre 1

Symétries, moment cinétique et spin

Les réponses aux questions physiques ne doivent pas dépendre de l'orientation du système de coordonnées choisie pour les calculer. Cette prescription détermine la transformation des champs classiques et quantiques sous rotation.

Dans le cadre de la physique classique, un champ (qui peut avoir plusieurs composantes, décrivant un vecteur ou un tenseur à chaque point) se transforme sous rotation de telle manière à former une représentation du groupe des rotations, $SO(3)$. En mécanique quantique, par contre, certains champs se transforment, sous rotation des axes de coordonnées, comme les composantes de spineurs; ainsi, ils forment des représentations de $SU(2)$ plutôt que de $SO(3)$. C'est ce que l'on se propose de montrer, entre autres, dans ce chapitre d'introduction [1, 2, 3, 4, 5, 6].

Notation :

- ★ $GL(n, \mathbb{C}) = \{M \mid M = \text{matrices } n \times n \text{ complexes avec } \det(M) \neq 0\}$
(matrices non-singulières complexes).
- ★ $GL(n, \mathbb{R}) = \{M \mid M = \text{matrices } n \times n \text{ réelles avec } \det(M) \neq 0\}$
(matrices non-singulières réelles).
- ★ $SL(n, \mathbb{C}) = \{M \in GL(n, \mathbb{C}) \mid \det(M) = +1\}$
(matrices unimodulaires complexes).
- ★ $SL(n, \mathbb{R}) = \{M \in GL(n, \mathbb{R}) \mid \det(M) = +1\}$
(matrices unimodulaires réelles).
- ★ $O(n) = \{R \in GL(n, \mathbb{R}) \mid R^T R = \mathbb{1}_n\}$
(matrices orthogonales).
- ★ $SO(n) = \{R \in O(n) \mid \det(R) = 1\}$
(rotations en n dimensions).
- ★ $U(n) = \{S \in GL(n, \mathbb{C}) \mid S^* S = \mathbb{1}_n\}$
(matrices unitaires).
- ★ $SU(n) = \{S \in U(n) \mid \det(S) = 1\}$.

Soit $M \in GL(n, \mathbb{C})$ une matrice non-singulière complexe. Nous dénotons par M^{-1} sa matrice inverse, par M^T sa matrice transposée, par \bar{M} sa matrice complexe conjuguée et par $M^* = \bar{M}^T$ sa conjuguée hermitienne.

Définition 1.0.1 *Un groupe de matrices $G \subset GL(n, \mathbb{C})$ qui décrit une surface polynômiale régulière dans \mathbb{C}^{n^2} est appelé un groupe de Lie.*

Une surface polynômiale dans \mathbb{C}^m est une surface \mathcal{S} qui est donnée par un nombre de conditions polynômiales,

$$\mathcal{S} = \{x \in \mathbb{C}^m \mid P_1(x) = P_2(x) = \dots = P_k(x) = 0\} , \quad k < m . \quad (1.1)$$

La surface \mathcal{S} est régulière si les polynômes $P_1(x), \dots, P_k(x)$ peuvent être choisis tels que le rang de la matrice $\frac{\partial P_i}{\partial x^j}$ est maximal pour tout $x \in \mathcal{S}$. Le nombre $(m - k)$ est la dimension de la surface \mathcal{S} . Elle peut être paramétrisée localement par $(m - k)$ paramètres; ceci est une conséquence du théorème des fonctions implicites.

Un exemple d'une condition polynômiale est $P(M) = \det(M) - 1$. Elle est non-dégénérée si la matrice $\frac{\partial P(M)}{\partial M_{ij}} \equiv P_{ij}(M) \neq 0$ pour tout M avec $P(M) = 0$.

La définition donnée d'un groupe de Lie n'est pas la définition générale abstraite, mais elle suffit pour les besoins de ce cours. Tous les groupes donnés en page 4 sont des groupes de Lie.

Définition 1.0.2 *Soit $G \subset GL(n, \mathbb{C})$ un groupe de Lie. L'algèbre de Lie correspondant à G est donnée par*

$$\mathcal{G} = \{M \mid \text{matrice } n \times n \text{ telle que } \exp(tM) \in G, \forall t \in \mathbb{R}\} . \quad (1.2)$$

Ici, $\exp(tM)$ est défini par

$$\exp(tM) = 1 + tM + \frac{1}{2}(tM)^2 + \dots + \frac{1}{n!}(tM)^n + \dots . \quad (1.3)$$

Il est relativement facile de démontrer que \mathcal{G} est un espace linéaire (réel) de la même dimension que celle du groupe de Lie G , et que pour $M, N \in \mathcal{G}$, nous avons $[M, N] \equiv MN - NM \in \mathcal{G}$. De plus, si $S \in G$ et $M \in \mathcal{G}$, alors $SMS^{-1} \in \mathcal{G}$ (pour plus de détails, voir [7]).

1.1 Invariance sous rotation et moment cinétique pour des particules sans spin ($s = 0$)

Dans l'espace de Hilbert, $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, une particule sans spin n'est pas représentée par un unique vecteur complexe $\Psi \in \mathcal{H}$, mais par un *rayon unitaire*, noté $[\Psi]$:

$$[\Psi] = \{e^{i\alpha}\Psi \mid \alpha \in \mathbb{R}, \} . \quad (1.4)$$

Un élément $\Psi \in [\Psi]$ est appelé une *fonction d'onde*. Le produit scalaire entre deux fonctions d'onde $\Phi, \Psi \in \mathcal{H}$ est défini par l'application $(\cdot, \cdot) : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$,

$$(\Phi, \Psi) := \int d^3x \bar{\Phi}(x)\Psi(x) . \quad (1.5)$$

Evidemment, $(\Phi, \Psi) = \overline{(\Psi, \Phi)}$. De plus, nous avons les propriétés $(\Phi, \Psi_1 + \Psi_2) = (\Phi, \Psi_1) + (\Phi, \Psi_2)$ et $(\Phi_1 + \Phi_2, \Psi) = (\Phi_1, \Psi) + (\Phi_2, \Psi)$. Finalement, si $a \in \mathbb{C}$, $(\Phi, a\Psi) = a(\Phi, \Psi)$ et $(a\Phi, \Psi) = \bar{a}(\Phi, \Psi)$.

Soit $O(n)$ le groupe des matrices $n \times n$ orthogonales réelles, i.e., $R^T R = \mathbb{1}_n$. Pour chaque $R \in O(3)$, on définit un opérateur $\mathcal{U}(R) : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ tel que

$$[\mathcal{U}(R)\Psi](\mathbf{x}) := \Psi(R^{-1}\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3. \quad (1.6)$$

L'opérateur $\mathcal{U}(R)$ agit sur les fonctions, tandis que la transformation R agit sur les points de l'espace. Comme $|\det(R)| = 1$, nous avons

$$\begin{aligned} ([\mathcal{U}(R)\Phi](\mathbf{x}), [\mathcal{U}(R)\Psi](\mathbf{x})) &= (\Phi(R^{-1}\mathbf{x}), \Psi(R^{-1}\mathbf{x})) \\ &= \int d^3x \bar{\Phi}(R^{-1}\mathbf{x}) \Psi(R^{-1}\mathbf{x}) \\ &= \int d^3x \bar{\Phi}(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) |\det(R)| \\ &= (\Phi, \Psi). \end{aligned} \quad (1.7)$$

Ainsi, l'opérateur $\mathcal{U}(R)$ est unitaire puisqu'il laisse le produit scalaire invariant. De plus, nous avons

$$[\mathcal{U}(R_1)\Psi](\mathbf{x}) = \Psi(R_1^{-1}\mathbf{x}) =: \tilde{\Psi}(\mathbf{x}), \quad (1.8)$$

$$\begin{aligned} \{\mathcal{U}(R_2)[\mathcal{U}(R_1)\Psi]\}(\mathbf{x}) &= [\mathcal{U}(R_2)\tilde{\Psi}](\mathbf{x}) = \tilde{\Psi}(R_2^{-1}\mathbf{x}) = \Psi(R_1^{-1}[R_2^{-1}\mathbf{x}]) \\ &= \Psi([R_2R_1]^{-1}\mathbf{x}) = [\mathcal{U}(R_2R_1)\Psi](\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (1.9)$$

La propriété $\mathcal{U}(R_2)\mathcal{U}(R_1) = \mathcal{U}(R_2R_1)$ implique que l'application $\mathcal{U} : O(3) \rightarrow \text{uni}(\mathcal{H})$ est un homomorphisme. Ici $\text{uni}(\mathcal{H})$ signifie le groupe d'opérateurs unitaires sur l'espace de Hilbert, \mathcal{H} . En autres termes, \mathcal{U} est une représentation de $O(3)$.

Définition 1.1.1 Une représentation d'un groupe G sur un espace vectoriel complexe \mathcal{E} est un homomorphisme $\mathcal{D} : G \rightarrow \text{auto}(\mathcal{E})$ de G vers le groupe des automorphismes de \mathcal{E} .

Chaque représentation \mathcal{D} d'un groupe de Lie G induit une représentation \mathcal{D}_* de l'algèbre de Lie correspondante, \mathcal{G} . Pour $A \in \mathcal{G}$, elle est donnée par

$$\mathcal{D}(e^{At}) = e^{\mathcal{D}_*(A)t}, \quad \text{donc} \quad \mathcal{D}_*(A) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \mathcal{D}(e^{At}). \quad (1.10)$$

Nous voulons maintenant déterminer la représentation \mathcal{U}_* sur l'algèbre de Lie $\mathfrak{o}(3) = \mathfrak{so}(3)$ du groupe $O(3)$ induite par \mathcal{U} . Pour ceci, nous avons besoin des sous-groupes (additifs) à un paramètre de $O(3)$ ¹; ce sont les rotations d'angle α autour d'une direction \mathbf{e} fixée ($\|\mathbf{e}\|^2 = 1$). Nous les dénotons $\{R(\mathbf{e}, \alpha) \mid \alpha \in \mathbb{R}\}$. On a (exercice)

$$R(\mathbf{e}, \alpha)\mathbf{x} = \cos(\alpha)\mathbf{x} + [1 - \cos(\alpha)](\mathbf{e} \cdot \mathbf{x})\mathbf{e} + \sin(\alpha)\mathbf{e} \wedge \mathbf{x}. \quad (1.11)$$

Les $R(\mathbf{e}, \alpha)$ forment un groupe additif en α . En effet, nous avons²

$$R(\mathbf{e}, \alpha + \beta) = R(\mathbf{e}, \alpha)R(\mathbf{e}, \beta) = R(\mathbf{e}, \beta)R(\mathbf{e}, \alpha). \quad (1.12)$$

¹Exercice : Montrer que tout sous-groupe additif à un paramètre dans un groupe de Lie est de la forme $R(s) = \exp(As)$ pour un élément A dans l'algèbre de Lie, et donc $\left. \frac{d}{ds} R(s) \right|_{s=0}$ est un élément de l'algèbre de Lie.

²Nous rappelons que les rotations autour d'un axe fixe forment un groupe abélien, $SO(2)$.

Ceci nous permet de définir

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\alpha} R(\mathbf{e}, \alpha) &:= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} [R(\mathbf{e}, \alpha + \epsilon) - R(\mathbf{e}, \alpha)] \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} [R(\mathbf{e}, \epsilon) - R(\mathbf{e}, 0)] R(\mathbf{e}, \alpha) \\ &= \Omega R(\mathbf{e}, \alpha), \end{aligned} \quad (1.13)$$

où

$$\Omega = \left. \frac{d}{d\alpha} R(\mathbf{e}, \alpha) \right|_{\alpha=0} \quad \text{et, avec (1.11),} \quad \Omega \mathbf{x} = \mathbf{e} \wedge \mathbf{x}. \quad (1.14)$$

Ainsi, on a $\Omega = \mathbf{e} \cdot \mathbf{I}$ avec $(I_i)_{jk} = -\epsilon_{ijk}$, où ϵ_{ijk} dénote le tenseur antisymétrique à trois indices. Explicitement, nous avons

$$I_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.15)$$

L'équation (1.13) implique que $R(\mathbf{e}, \alpha) = \exp(\alpha \mathbf{e} \cdot \mathbf{I})$. Les I_j sont les générateurs infinitésimaux des rotations autour de l'axe \mathbf{e}_j . Ils forment une base de l'algèbre de Lie $so(3)$ du groupe $SO(3)$. Ainsi, ils satisfont aux relations de commutation

$$[I_i, I_j] = \sum_k \epsilon_{ijk} I_k, \quad (1.16)$$

$$[\mathbf{e} \cdot \mathbf{I}, \mathbf{n} \cdot \mathbf{I}] = (\mathbf{e} \wedge \mathbf{n}) \cdot \mathbf{I}, \quad \forall \mathbf{e}, \mathbf{n} \in \mathbb{R}^3. \quad (1.17)$$

Le groupe $\{\mathcal{U}(R(\mathbf{e}, \alpha)) \mid \alpha \in \mathbb{R}\}$ est un groupe unitaire à un paramètre. Or, d'après le théorème de Stone³, il existe un opérateur auto-adjoint $L(\mathbf{e})$ tel que

$$L(\mathbf{e})\Psi = i\hbar \left. \frac{d}{d\alpha} \mathcal{U}(R(\mathbf{e}, \alpha)) \right|_{\alpha=0} \Psi \quad (1.18)$$

dans le domaine de $L(\mathbf{e})$. On a donc

$$\mathcal{U}(R(\mathbf{e}, \alpha)) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha L(\mathbf{e})\right). \quad (1.19)$$

Si $\Psi(\mathbf{x})$ est une fonction d'onde différentiable, on a

$$\begin{aligned} L(\mathbf{e})\Psi(\mathbf{x}) &= i\hbar \left. \frac{d}{d\alpha} \Psi(R^{-1}(\mathbf{e}, \alpha)\mathbf{x}) \right|_{\alpha=0} \\ &= -i\hbar [\nabla \Psi(\mathbf{x})] \cdot (\mathbf{e} \wedge \mathbf{x}) \\ &= \mathbf{e} \cdot \left(\mathbf{x} \wedge \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi \right), \end{aligned} \quad (1.20)$$

³**Théorème de Stone** : Soit $\{\mathcal{U}_t \mid t \in \mathbb{R}\}$ un groupe à un paramètre d'opérateurs unitaires (fortement continu) sur un espace de Hilbert \mathcal{H} (donc $\mathcal{U}_t \mathcal{U}_s = \mathcal{U}_{t+s}$). Alors, il existe un opérateur auto-adjoint A sur \mathcal{H} tel que $A\Psi = -i\frac{d}{dt} \mathcal{U}_t \Psi \Big|_{t=0}$ et $\mathcal{U}_t = \exp(iAt)$ sur le domaine de définition de A . Pour plus de détails et la démonstration, cf. [8], chap. VIII, section 4.

ce qui implique

$$L(\mathbf{e}) = \mathbf{e} \cdot \mathbf{L} \quad \text{où} \quad \mathbf{L} = \mathbf{x} \wedge \frac{\hbar}{i} \nabla . \quad (1.21)$$

Ce résultat peut aussi être dérivé par une application naïve de la règle de correspondance, $\mathbf{L} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$, où $\mathbf{L}, \mathbf{x}, \mathbf{p}$ désignent respectivement le moment cinétique orbital d'une particule, sa position et son impulsion.

Ainsi, comme en mécanique classique, nous avons une relation entre le moment cinétique orbital et des rotations infinitésimales. Le moment cinétique (orbital) est le générateur des rotations.

D'après la définition 1.1.1, la représentation \mathcal{U}_* induite sur $o(3)$ est alors donnée par

$$L_j = i\hbar \mathcal{U}_*(I_j) . \quad (1.22)$$

Les règles de commutation des I_j sont héritées par les L_j :

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} L_k . \quad (1.23)$$

On peut facilement vérifier ce dernier résultat directement en appliquant (1.21) sur les fonctions d'onde différentiables.

Si un système est invariant sous rotation (par exemple, une particule dans un potentiel à symétrie sphérique), l'hamiltonien commute avec tous les $\mathcal{U}(R)$. Il s'ensuit que

$$[H, \mathbf{L}] = 0 \quad : \text{invariance sous rotation.} \quad (1.24)$$

Alors, les L_i sont invariants par rapport à une évolution temporelle; ils sont conservés :

$$\mathbf{L}\Psi_t = \mathbf{L}e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi_0 = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\mathbf{L}\Psi_0 . \quad (1.25)$$

On peut en conclure qu'un espace propre de l'hamiltonien avec valeur propre E "réduit" la représentation $\mathcal{U}(R)$ sur $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, puisque le sous-espace de chaque valeur propre de H est invariant par rapport aux rotations (voir exercices).

1.2 Les représentations irréductibles du groupe des rotations

Dans cette section nous voulons construire les représentations irréductibles de $SO(3)$.

Définition 1.2.1 Soit $\mathcal{D} : G \rightarrow \text{auto}(\mathcal{E})$ une représentation du groupe G sur l'espace vectoriel \mathcal{E} . Un sous-espace $W \subset \mathcal{E}$ est dit invariant si $\mathcal{D}(g)w \in W$ pour tout $g \in G$ et $w \in W$. (On écrit souvent brièvement $\mathcal{D}(G)W \subset W$.) La représentation \mathcal{D} est dite irréductible si \mathcal{E} n'a pas de sous-espace invariant non-trivial (c'est-à-dire, autre que $\{0\}$ et \mathcal{E}).

Si \mathcal{E} admet un produit scalaire et si la représentation \mathcal{D} est **unitaire**, c'est-à-dire $(\mathcal{D}(g)v, \mathcal{D}(g)w) = (v, w)$, avec W aussi W^\perp est un sous-espace invariant. Ici $W^\perp = \{v \in \mathcal{E} \mid (v, w) = 0, \forall w \in W\}$ (exercice). Comme $\mathcal{E} = W \oplus W^\perp$, l'union d'une base orthonormée de W et d'une base orthonormée de W^\perp forme alors une base orthonormée de \mathcal{E} . Dans cette base, la représentation \mathcal{D} se décompose en deux blocs, $\mathcal{D}^1 \oplus \mathcal{D}^2$, où \mathcal{D}^1 est une représentation de G sur W et \mathcal{D}^2 est une

représentation de G sur W^\perp . Si la dimension de \mathcal{E} est finie, on peut poursuivre cette décomposition dans W et W^\perp , ce qui revient à décomposer \mathcal{D} en blocs irréductibles. A la fin, on obtient $\mathcal{E} = W^1 \oplus W^2 \oplus \dots \oplus W^n$, où les W^j portent des représentations irréductibles \mathcal{D}^j de G . Dans une base orthonormée de \mathcal{E} adaptée à cette décomposition, la matrice qui représente un automorphisme $\mathcal{D}(g)$ est composée des blocs :

$$\mathcal{D}(g) = \begin{pmatrix} \mathcal{D}^1(g) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathcal{D}^2(g) & 0 & \cdots \\ & & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & \mathcal{D}^n(g) \end{pmatrix}. \quad (1.26)$$

On peut démontrer [7] que cette décomposition se laisse effectuer pour toute représentation d'un groupe compact (groupe de Lie dont les éléments de matrice sont bornés). Les représentations irréductibles sont alors les plus importantes.

Pour construire les représentations irréductibles de $SO(3)$ (qui est bien sûr un groupe compact, exercice!), nous considérons d'abord une représentation \mathcal{D}_* de l'algèbre de Lie $so(3)$ sur un espace vectoriel \mathcal{E} à dimension finie. Les matrices $(I_j)_{j=1}^3$ forment une base de $so(3)$ et nous posons

$$\mathcal{D}_*(I_j) = (i\hbar)^{-1} L_j. \quad (1.27)$$

Nous définissons encore

$$\mathbf{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2, \quad (1.28)$$

$$L_\pm := L_1 \pm iL_2. \quad (1.29)$$

En utilisant les relations de commutation (1.23) pour les composantes L_j , il est facile de vérifier que

$$[\mathbf{L}^2, L_j] = 0 = [\mathbf{L}^2, L_\pm], \quad (1.30)$$

$$[L_3, L_\pm] = \pm \hbar L_\pm, \quad (1.31)$$

$$L_\pm L_\mp = \mathbf{L}^2 - L_3^2 \pm \hbar L_3. \quad (1.32)$$

Comme \mathbf{L}^2 est un opérateur hermitien, \mathbf{L}^2 se laisse diagonaliser par une matrice unitaire. Il existe donc une base orthonormée de vecteurs propres de \mathbf{L}^2 . Comme \mathbf{L}^2 et L_3 commutent, les espaces propres de \mathbf{L}^2 de valeur propre λ sont invariants sous L_3 : soit ψ un vecteur propre de \mathbf{L}^2 avec valeur propre λ , alors $\mathbf{L}^2 L_3 \psi = L_3 \mathbf{L}^2 \psi = \lambda L_3 \psi$. Il s'ensuit que $L_3 \psi$ est aussi vecteur propre de \mathbf{L}^2 avec valeur propre λ . Comme L_3 est aussi un opérateur hermitien, nous pouvons le diagonaliser dans chacun des espaces propres de \mathbf{L}^2 et obtenons de cette façon une base de \mathcal{E} dans laquelle \mathbf{L}^2 et L_3 sont les deux diagonales. Soit ψ_{\max} un vecteur propre normalisé de L_3 et de \mathbf{L}^2 ,

$$L_3 \psi_{\max} = \hbar b \psi_{\max}, \quad \mathbf{L}^2 \psi_{\max} = \hbar^2 a \psi_{\max}, \quad (1.33)$$

où $\hbar b$ est la valeur propre maximale de l'opérateur L_3 . Comme $\mathbf{L}^2 \geq L_3^2$, nous avons $a \geq b^2 \geq 0$. En combinant (1.31) et (1.33), nous obtenons

$$L_3 L_+ \psi_{\max} = L_+ L_3 \psi_{\max} + \hbar L_+ \psi_{\max} = \hbar(b+1) L_+ \psi_{\max}. \quad (1.34)$$

Donc $L_+\psi_{\max}$ est soit un vecteur propre de L_3 avec valeur propre $\hbar(b+1) > \hbar b$, soit nulle. Or, comme nous avons supposé que $\hbar b$ est la valeur propre maximale de l'opérateur L_3 , ceci implique que $L_+\psi_{\max} = 0$. D'après (1.32),

$$\mathbf{L}^2 = L_3^2 + L_+L_- - \hbar L_3, \quad (1.35)$$

$$= L_3^2 + L_-L_+ + \hbar L_3. \quad (1.36)$$

En appliquant Eq. (1.36) à ψ_{\max} , nous obtenons

$$\hbar^2 a \psi_{\max} = \mathbf{L}^2 \psi_{\max} = (L_3^2 + \hbar L_3) \psi_{\max} = (\hbar^2 b^2 + \hbar^2 b) \psi_{\max}, \quad (1.37)$$

donc $a = b(b+1)$. Nous agissons maintenant avec L_- sur ψ_{\max} et trouvons

$$L_3 L_- \psi_{\max} = L_- L_3 \psi_{\max} - \hbar L_- \psi_{\max} = \hbar(b-1) L_- \psi_{\max}. \quad (1.38)$$

Donc $L_- \psi_{\max}$ est un vecteur propre de L_3 avec valeur propre $\hbar(b-1)$. En continuant ainsi, on obtient que $(L_-)^n \psi_{\max}$ est soit vecteur propre de L_3 avec valeur propre $\hbar(b-n)$, soit identiquement nul. Comme L_3 possède une valeur propre minimale, il doit exister un n maximal, tel que $(L_-)^{n+1} \psi_{\max} = 0$. En utilisant Eq. (1.35), nous trouvons

$$\begin{aligned} \hbar^2 a (L_-)^n \psi_{\max} &= (L_-)^n \mathbf{L}^2 \psi_{\max} = \mathbf{L}^2 (L_-)^n \psi_{\max} = [L_3^2 - \hbar L_3] (L_-)^n \psi_{\max} \\ &= \hbar^2 [(b-n)^2 - (b-n)] (L_-)^n \psi_{\max}. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Donc $a = b(b+1) = (b-n)^2 - b + n$, i.e., $b = n/2 \equiv \ell$. Ainsi, ℓ ne peut prendre que des valeurs entières ou demi-entières.

Pour la suite, nous posons

$$\psi_{\max} = \psi_\ell \quad \text{et} \quad \frac{(L_-)^n \psi_{\max}}{\|(L_-)^n \psi_{\max}\|} = \psi_{\ell-n}. \quad (1.40)$$

Nous trouvons alors $\forall 0 \leq n \leq 2\ell$

$$L_3 \psi_{\ell-n} = \hbar(\ell-n) \psi_{\ell-n} \quad \text{et} \quad \mathbf{L}^2 \psi_{\ell-n} = \hbar^2 \ell(\ell+1) \psi_{\ell-n}. \quad (1.41)$$

Evidemment, l'espace linéaire engendré par les vecteurs normalisés $\psi_{\ell-n}$ avec $0 \leq n \leq 2\ell$, porte une représentation irréductible de $so(3)$ de dimension $2\ell+1$. Elle est irréductible parce qu'on peut obtenir tous les vecteurs de base ψ_m en appliquant L_- sur ψ_ℓ (ou en appliquant L_+ sur $\psi_{-\ell}$).

Les vecteurs $\psi_{\ell-n}$ forment une base orthonormée. En effet, ils sont des vecteurs propres de l'opérateur hermitien L_3 avec des valeurs propres différentes, et sont donc orthogonaux. De plus, toutes les représentations irréductibles de $so(3)$ de dimension finie sont de cette forme pour un $\ell \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\}$.

Il nous reste à déterminer lesquelles de ces représentations peuvent être "élevées" à une représentation du groupe $SO(3)$. Nous allons voir que seulement les ℓ entiers correspondent aussi à une représentation de $SO(3)$.

1.2.1 Les harmoniques sphériques

Dans cette section, nous construisons explicitement les représentations \mathcal{D}^ℓ , $\ell \in \mathbb{N}$, sur l'espace des fonctions sur la sphère, \mathbb{S}^2 . Pour un ℓ donné, nous cherchons d'abord des fonctions $\psi_{\ell,m}(r, \vartheta, \varphi)$ sur \mathbb{R}^3 telles que

$$\begin{cases} \mathbf{L}^2 \psi_{\ell,m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) \psi_{\ell,m}, \\ L_3 \psi_{\ell,m} = \hbar m \psi_{\ell,m}, \end{cases} \quad \text{avec} \quad -\ell \leq m \leq \ell. \quad (1.42)$$

D'après (1.21), nous avons $\mathbf{L} = -i\hbar\mathbf{x} \wedge \nabla$. Nous exprimons cette identité en coordonnées sphériques, avec la notation

$$\mathbf{x} = r \begin{pmatrix} \sin(\vartheta) \cos(\varphi) \\ \sin(\vartheta) \sin(\varphi) \\ \cos(\vartheta) \end{pmatrix}, \quad (1.43)$$

$$\nabla = \mathbf{e}_r \partial_r + \frac{1}{r} \mathbf{e}_\vartheta \partial_\vartheta + \frac{1}{r \sin(\vartheta)} \mathbf{e}_\varphi \partial_\varphi, \quad (1.44)$$

où \mathbf{e}_r , \mathbf{e}_ϑ , \mathbf{e}_φ sont les vecteurs unitaires en directions r , ϑ et φ :

$$\mathbf{e}_r = \begin{pmatrix} \sin(\vartheta) \cos(\varphi) \\ \sin(\vartheta) \sin(\varphi) \\ \cos(\vartheta) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_\vartheta = \begin{pmatrix} \cos(\vartheta) \cos(\varphi) \\ \cos(\vartheta) \sin(\varphi) \\ -\sin(\vartheta) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_\varphi = \begin{pmatrix} -\sin(\varphi) \\ \cos(\varphi) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.45)$$

En combinant ces expressions, nous obtenons

$$\mathbf{L} = i\hbar \begin{pmatrix} \cos(\varphi) \cot(\vartheta) \partial_\varphi + \sin(\varphi) \partial_\vartheta \\ \sin(\varphi) \cot(\vartheta) \partial_\varphi - \cos(\varphi) \partial_\vartheta \\ -\partial_\varphi \end{pmatrix}. \quad (1.46)$$

Donc $L_3 = i\hbar \partial_\varphi$ et les opérateurs \mathbf{L}^2 et L_\pm sont

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin(\vartheta)} \partial_\vartheta (\sin(\vartheta) \partial_\vartheta) + \frac{1}{\sin(\vartheta)^2} \partial_\varphi^2 \right] = -\hbar^2 r^2 \Delta_{\vartheta\varphi}, \quad (1.47)$$

$$L_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi} [\pm \partial_\vartheta + i \cot(\vartheta) \partial_\varphi]. \quad (1.48)$$

Ces expressions nous permettent de rechercher les fonctions $\psi_{\ell,m}(r, \vartheta, \varphi)$ qui sont solutions des Eq. (1.42), i.e., qui satisfont au système d'équations

$$\frac{1}{\sin(\vartheta)} \partial_\vartheta (\sin(\vartheta) \partial_\vartheta \psi_{\ell,m}) + \frac{1}{\sin(\vartheta)^2} \partial_\varphi^2 \psi_{\ell,m} = -\ell(\ell+1) \psi_{\ell,m}, \quad (1.49)$$

$$-i \partial_\varphi \psi_{\ell,m} = m \psi_{\ell,m}. \quad (1.50)$$

Dans ces équations, la variable r n'apparaît dans aucun opérateur différentiel ; on peut donc considérer r comme un paramètre et décomposer les fonctions propres $\psi_{\ell,m}(r, \vartheta, \varphi)$ sous la forme

$$\psi_{\ell,m}(r, \vartheta, \varphi) = f(r) Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi), \quad (1.51)$$

où $f(r)$, la fonction radiale, apparaît comme un facteur constant dans les équations aux dérivées partielles (1.49)–(1.50). Les fonctions $Y_{\ell,m}$ sont des fonctions sur la sphère, que nous choisissons normalisées telles que

$$\int_0^\pi \sin(\vartheta) d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi |Y_{\ell,m}|^2 = 1. \quad (1.52)$$

On les appelle les **harmoniques sphériques**.

Avec cette décomposition, le système d'équations se réduit à

$$\frac{1}{\sin(\vartheta)} \partial_\vartheta (\sin(\vartheta) \partial_\vartheta Y_{\ell,m}) + \frac{1}{\sin(\vartheta)^2} \partial_\varphi^2 Y_{\ell,m} = \ell(\ell+1) Y_{\ell,m}, \quad (1.53)$$

$$-i \partial_\varphi Y_{\ell,m} = m Y_{\ell,m}. \quad (1.54)$$

La dernière équation implique immédiatement

$$Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi) = g(\vartheta)e^{im\varphi} . \quad (1.55)$$

Ceci implique que $m \in \mathbb{Z}$ pour que les fonctions $Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi)$ soient bien définies. Or, comme nous savons que m et ℓ sont soit tous deux entiers, soit tous deux demi-entiers, il s'ensuit que ℓ aussi ne peut être qu'entier.

Nous essayons un "Ansatz" de la forme

$$Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi) = \frac{c_{\ell,m}}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} P_{\ell}^m(\mu) \quad \text{où} \quad \mu = \cos(\vartheta) . \quad (1.56)$$

Les $c_{\ell,m}$ sont des constantes de normalisation. Si l'on utilise $\frac{d}{d\mu} = -\sin(\vartheta)^{-1} \partial_{\vartheta}$, Eq. (1.53) se réduit à

$$\left[(1-\mu^2) \frac{d^2}{d\mu^2} - 2\mu \frac{d}{d\mu} + \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-\mu^2} \right] P_{\ell}^m(\mu) = 0 . \quad (1.57)$$

Ceci est l'équation différentielle pour les fonctions de Legendre associées. Pour $m=0$, cette équation se réduit à l'équation différentielle pour les polynômes de Legendre, P_{ℓ} . Dans les exercices, nous vérifierons que Eq. (1.57) est satisfaite par les fonctions

$$P_{\ell}^m(\mu) = \frac{(-1)^m}{2^{\ell} \ell!} (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{d\mu^{\ell+m}} (\mu^2-1)^{\ell} . \quad (1.58)$$

De cette expression, on peut facilement extraire une relation de récurrence,

$$P_{\ell}^{m+1}(\mu) = -\sqrt{1-\mu^2} \left[\frac{d}{d\mu} + \frac{m\mu}{1-\mu^2} \right] P_{\ell}^m(\mu) . \quad (1.59)$$

Ainsi, on a

$$\begin{aligned} \hbar^{-1} L_+ Y_{\ell,m} &= \frac{c_{\ell,m}}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\varphi} [\partial_{\vartheta} - m \cot(\vartheta)] P_{\ell}^m(\mu) \\ &= -\frac{c_{\ell,m}}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\varphi} \sqrt{1-\mu^2} \left[\frac{d}{d\mu} + \frac{m\mu}{1-\mu^2} \right] P_{\ell}^m(\mu) \\ &= \frac{c_{\ell,m}}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\varphi} P_{\ell}^{m+1}(\mu) \\ &= \frac{c_{\ell,m}}{c_{\ell,m+1}} Y_{\ell,m+1} . \end{aligned} \quad (1.60)$$

Pour déterminer les constantes de normalisation $c_{\ell,m}$, nous utilisons la normalisation des harmoniques sphériques,

$$1 = (Y_{\ell,m}, Y_{\ell,m}) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin(\vartheta) \bar{Y}_{\ell,m} Y_{\ell,m} . \quad (1.61)$$

Avec Eq. (1.60), cette relation implique

$$\begin{aligned} \left| \frac{c_{\ell,m}}{c_{\ell,m+1}} \right|^2 &= \hbar^{-2} (L_+ Y_{\ell,m}, L_+ Y_{\ell,m}) \\ &= \hbar^{-2} (Y_{\ell,m}, L_- L_+ Y_{\ell,m}) \\ &= \hbar^{-2} (Y_{\ell,m}, [L^2 - L_3^2 - \hbar L_3] Y_{\ell,m}) \\ &= \ell(\ell+1) - m(m+1) , \end{aligned} \quad (1.62)$$

donc

$$\hbar^{-1} L_+ Y_{\ell, m} = \frac{c_{\ell, m}}{c_{\ell, m+1}} Y_{\ell, m+1} = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} Y_{\ell, m+1} . \quad (1.63)$$

En appliquant L_- sur cette équation et utilisant Eq. (??) nous obtenons

$$\hbar^2 [\ell(\ell+1) - m(m+1)] Y_{\ell, m} = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} L_- Y_{\ell, m+1} , \quad (1.64)$$

ce qui implique

$$L_- Y_{\ell, m+1} = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} Y_{\ell, m} . \quad (1.65)$$

Nous pouvons combiner les résultats (1.63)–(1.65) en

$$\boxed{L_{\pm} Y_{\ell, m} = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} Y_{\ell, m \pm 1}} \quad (1.66)$$

Les constantes $c_{\ell, \ell}$ peuvent être déterminées en appliquant l'opérateur L_+ sur $Y_{\ell, \ell}$. En effet, l'identité $L_+ Y_{\ell, \ell} = 0$ implique

$$[\partial_{\vartheta} - \ell \cot(\vartheta)] P_{\ell}^{\ell}(\cos(\vartheta)) = 0 , \quad (1.67)$$

avec solution

$$P_{\ell}^{\ell} = \frac{(-1)^{\ell} (2\ell)!}{2^{\ell} \ell!} \sin(\vartheta)^{\ell} . \quad (1.68)$$

Pour que $Y_{\ell, \ell}$ soit normalisé, il faut que

$$\int_0^{\pi} d\vartheta c_{\ell, \ell}^2 |P_{\ell}^{\ell}|^2 \sin(\vartheta) = 1 . \quad (1.69)$$

Cette identité requiert (exercice),

$$c_{\ell, \ell} = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{2(2\ell)!}} . \quad (1.70)$$

Nous avons donc trouvé

$$Y_{\ell, \ell} = \frac{(-1)^{\ell}}{2^{\ell} \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} \sin(\vartheta)^{\ell} e^{i\ell\varphi} . \quad (1.71)$$

En utilisant la relation de récurrence

$$c_{\ell, m-1} = c_{\ell, m} \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)} , \quad (1.72)$$

nous pouvons déduire toutes les autres harmoniques sphériques,

$$\boxed{Y_{\ell, m}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_{\ell}^m(\cos(\vartheta)) e^{im\varphi}} \quad (1.73)$$

L'identité (dérivée dans les exercices)

$$P_{\ell}^{-m} = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_{\ell}^m \quad (1.74)$$

implique finalement

$$\boxed{Y_{\ell,-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m \bar{Y}_{\ell,m}(\vartheta, \varphi)} \quad (1.75)$$

Aux ordres les plus bas, les harmoniques sphériques sont alors données par

$$\begin{aligned} \ell = 0 : \quad Y_{0,0}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} , \\ \ell = 1 : \quad Y_{1,0}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\vartheta) , \\ &Y_{1,1}(\vartheta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\vartheta) e^{i\varphi} , \\ \ell = 2 : \quad Y_{2,0}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} [3 \cos^2(\vartheta) - 1] , \\ &Y_{2,1}(\vartheta, \varphi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin(\vartheta) \cos(\vartheta) e^{i\varphi} , \\ &Y_{2,2}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2(\vartheta) e^{2i\varphi} . \end{aligned} \quad (1.76)$$

1.3 Automorphismes de Wigner et représentations projectives

Comme nous l'avons dit, un état physique n'est pas vraiment représenté par une fonction d'onde $\Psi \in \mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, mais par un rayon unitaire $[\Psi]$. En général, une symétrie physique n'est alors pas représentée par une transformation sur \mathcal{H} , mais par un automorphisme α sur les rayons unitaires et sur les observables A (opérateurs auto-adjoints sur \mathcal{H}).

Définition 1.3.1 *Un automorphisme de Wigner est une application sur les rayons unitaires telle que :*

- i) $[\Psi] \mapsto \alpha([\Psi])$ est surjective,
- ii) $(\alpha[\Phi], \alpha[\Psi]) = ([\Phi], [\Psi])$ où nous posons $([\Phi], [\Psi]) := |(\Phi, \Psi)|$.
(Il est évident que cette définition ne dépend pas des représentants $\Phi \in [\Phi]$ et $\Psi \in [\Psi]$.)

Théorème 1.3.1 (Wigner, cf. [7]) *Soit G un groupe, représenté sur les rayons unitaires par un automorphisme de Wigner α_g , tel que*

$$\alpha_{g_1} \circ \alpha_{g_2} = \alpha_{g_1 g_2} . \quad (1.77)$$

Pour tout $g \in G$, il existe alors une transformation $\mathcal{U}(g)$ sur \mathcal{H} qui est soit unitaire, soit anti-unitaire⁴, telle que

$$\alpha_g[\Psi] = [\mathcal{U}(g)\Psi] . \quad (1.78)$$

$\mathcal{U}(g)$ est unique à une phase près et

$$\mathcal{U}(g_1)\mathcal{U}(g_2) = \omega(g_1, g_2)\mathcal{U}(g_1 g_2) \quad \text{avec} \quad |\omega(g_1, g_2)| = 1 . \quad (1.79)$$

⁴Une transformation \mathcal{U} anti-unitaire est un automorphisme anti-linéaire qui satisfait $(\mathcal{U}\Phi, \mathcal{U}\Psi) = (\Phi, \Psi)$.

L'application $g \mapsto \mathcal{U}(g)$ est appelée une "représentation projective" du groupe G dans \mathcal{H} .

Théorème 1.3.2 (Bargmann, cf. [7]) Pour les groupes de Lie connexes et des représentations continues, $\mathcal{U}(g)$ est unitaire et, pour "une grande classe de groupes", on peut choisir les phases $\omega(g_1, g_2) = 1$ dans un voisinage de l'unité $\mathbb{I} \in G$.

Remarques :

- Comme $\alpha_{\mathbb{I}} = \text{identité}$, on peut choisir $\mathcal{U}(\mathbb{I}) = \mathbb{I}$, ce qui est unitaire. La continuité implique alors que $\mathcal{U}(g)$ soit unitaire dans tout un voisinage de \mathbb{I} , $N(\mathbb{I})$. Mais tout élément dans la composante G_0 de l'unité peut être représenté comme $g \in G_0$, $g = a_1 \circ a_2 \circ \dots \circ a_n$, $a_j \in N(\mathbb{I})$. Alors, $\mathcal{U}(g) = \omega \mathcal{U}(a_1) \dots \mathcal{U}(a_n)$ est aussi unitaire. Donc, dans la composante (topologique) de \mathbb{I} d'un groupe de Lie, les $\mathcal{U}(g)$ sont des transformations unitaires.
- Du théorème de Bargmann, il suit alors que \mathcal{U} est une représentation locale, continue et unitaire du sous-groupe $G_0 \subset G$.
- Il est intéressant de savoir que "la grande classe" contient tous les groupes de Lie semi-simples (en particulier, les $SO(n)$), le groupe de Lorentz inhomogène (= le groupe de Poincaré), mais pas le groupe de Galilée!
- On peut montrer que les phases $\omega(g_1, g_2)$ se laissent entièrement éliminer si le groupe G_0 est simplement connexe. Comme nous le verrons par la suite, ceci n'est pas le cas pour le $SO(3)$, qui n'est pas simplement connexe. Mais cette observation motive la définition du *recouvrement universel*.

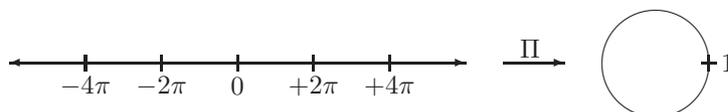
Définition 1.3.2 Le *recouvrement universel* d'un groupe de Lie (espace topologique) G est un couple (\tilde{G}, Π) où \tilde{G} est un groupe de Lie (espace topologique) simplement connexe, et $\Pi : \tilde{G} \rightarrow G$ est un homomorphisme (application continue qui respecte la multiplication, i.e., $\Pi(g_1)\Pi(g_2) = \Pi(g_1g_2)$) qui est surjectif et localement injectif.

En d'autres termes, pour tout $\tilde{g} \in \tilde{G}$, il existe un voisinage $N(\tilde{g}) \subset \tilde{G}$, tel que $\Pi : N(\tilde{g}) \rightarrow \Pi(N(\tilde{g}))$ est bijective. Donc, pour un petit voisinage $M(g)$ d'un point $g \in G$, $\Pi^{-1}(M(g))$ consiste de l'union finie ou dénombrable d'ensembles disjoints⁵.

Le recouvrement universel existe et il est unique pour tout groupe de Lie connexe.

Exemple :

L'application $\Pi : \tilde{G} = \mathbb{R} \rightarrow G = U(1)$ telle que $x \mapsto \Pi(x) = e^{ix}$, implique $\ker(\Pi) = 2\pi \cdot \mathbb{Z}$ et donc $G \cong \tilde{G}/\mathbb{Z}$.



Soit maintenant \mathcal{U} notre représentation locale unitaire de $G = G_0$ (nous considérons un G connexe) sur \mathcal{H} . Alors, $\tilde{\mathcal{U}} := \mathcal{U} \circ \Pi$ est une représentation locale unitaire de \tilde{G} , et nous pouvons éliminer les phases de $\tilde{\mathcal{U}}$. C'est-à-dire, nous pouvons choisir les phases $\omega(g_1, g_2)$ de \mathcal{U} telles que $\tilde{\mathcal{U}}$ est une représentation unitaire de \tilde{G} .

⁵On peut montrer que $\ker(\Pi)$ est un diviseur normal discret Z de \tilde{G} et $G = \tilde{G}/Z$.

$$\begin{array}{ccc}
\tilde{G} & & \\
\downarrow \Pi & \searrow \tilde{U} & \\
G & & \text{uni}(\mathcal{H}) \\
& \nearrow U &
\end{array}$$

En mécanique quantique, un groupe connexe de transformations physiques est alors réalisé par une représentation unitaire du groupe de recouvrement universel.

1.4 Le groupe $SU(2)$ comme recouvrement universel de $SO(3)$

Dans ce paragraphe, nous montrons que $SU(2)$ est le recouvrement universel de $SO(3)$. C'est pour cette raison que l'on appelle parfois $SU(2)$ le "groupe de rotation de la mécanique quantique". Ceci est correct dans le sens strict que nous venons d'élaborer.

a) $\tilde{G} = SU(2)$ est simplement connexe

Soit $U \in SU(2)$, i.e., $U^* = U^{-1}$ et $\det(U) = +1$. La matrice la plus générale de ce groupe peut être écrite sous la forme

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix}, \quad \det(U) = |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (1.80)$$

Comme les coefficients peuvent être complexes, nous posons $a = a_1 + ia_2$ et $b = b_1 + ib_2$, où $a_1, a_2, b_1, b_2 \in \mathbb{R}$. Ceci laisse trois paramètres indépendants (qui peuvent être reliés aux trois angles d'Euler) : $\det(U) = a_1^2 + a_2^2 + b_1^2 + b_2^2 = 1$, i.e., $(a_1, a_2, b_1, b_2) \in \mathbb{S}^3$. Donc $SU(2)$ est homéomorphe à \mathbb{S}^3 ; mais \mathbb{S}^3 est simplement connexe et donc $SU(2)$ aussi.

b) Homomorphisme $SU(2) \rightarrow SO(3)$

La correspondance entre le groupe des rotations $SO(3)$ et le groupe unitaire $SU(2)$ peut être mise en évidence à l'aide des matrices de Pauli ⁶,

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.81)$$

On vérifie facilement que

$$[\sigma_j, \sigma_k] \equiv \sigma_j \sigma_k - \sigma_k \sigma_j = 2i \epsilon_{jkl} \sigma_l. \quad (1.82)$$

Il est évident que toute matrice 2×2 hermitienne ($X^* = X$) et de trace nulle peut être exprimée comme combinaison linéaire réelle des matrices σ_k , $k = 1, 2, 3$. Soit la notation $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ et $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3) \in \mathbb{R}^3$. Nous considérons l'application

$$\begin{aligned}
\sim : \mathbb{R}^3 &\rightarrow \mathbb{C}^{2 \times 2} \\
\mathbf{x} &\mapsto \tilde{x} = \begin{pmatrix} x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & -x^3 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \quad (1.83)$$

⁶Certaines propriétés des matrices Pauli sont données dans l'Annexe A.2.

Nous avons donc $\tilde{x} = \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\sigma} = x^1 \sigma_1 + x^2 \sigma_2 + x^3 \sigma_3$. La matrice \tilde{x} est hermitienne, $\tilde{x}^* := \overline{\tilde{x}}^T = \tilde{x}$, et de trace nulle, $\text{tr}(\tilde{x}) = 0$. De plus, son déterminant est $\det(\tilde{x}) = -|\mathbf{x}|^2$. Or, toute matrice $X \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ hermitienne et de trace nulle prend la forme \tilde{x} , avec $x^1 = \text{Re}(X_{12})$, $x^2 = -\text{Im}(X_{12})$ et $x^3 = \text{Re}(X_{11}) = X_{11}$. Soient encore \tilde{x}_{ij} les coefficients de la matrice \tilde{x} . En résolvant Eq. (1.83) pour les coordonnées x^i , nous obtenons

$$x^1 = \frac{1}{2}(\tilde{x}_{21} + \tilde{x}_{12}) , \quad x^2 = \frac{1}{2i}(\tilde{x}_{21} - \tilde{x}_{12}) , \quad x^3 = \tilde{x}_{11} = -\tilde{x}_{22} . \quad (1.84)$$

Maintenant, nous appliquons une transformation unitaire sur \tilde{x} de manière à obtenir une nouvelle matrice X' :

$$X' = U \tilde{x} U^* . \quad (1.85)$$

Pour la transformation unitaire, nous choisissons une matrice $U \in SU(2)$ quelconque, donnée par Eq. (1.80). Nous avons $\text{tr}(X') = \text{tr}(\tilde{x}) = 0$. D'autre part, la matrice X' est également hermitienne, $(X')^* = (U \tilde{x} U^*)^* = U \tilde{x}^* U^* = U \tilde{x} U^* = X'$. En vertu de ce que nous avons dit précédemment, nous pouvons donc écrire

$$X' = \begin{pmatrix} x'^3 & x'^1 - ix'^2 \\ x'^1 + ix'^2 & -x'^3 \end{pmatrix} , \quad (1.86)$$

pour certains nombres réels x'^1, x'^2, x'^3 . Nous posons $\mathbf{x}' = (x'^1, x'^2, x'^3) \in \mathbb{R}^3$. Donc $X' = \tilde{x}'$. Alors, Eq. (1.85) implique que $\det(X') = \det(\tilde{x})$, i.e., $|\mathbf{x}'|^2 = |\mathbf{x}|^2$. La relation entre x^1, x^2, x^3 et x'^1, x'^2, x'^3 est évidemment linéaire pour une matrice U donnée. Il existe alors une transformation linéaire orthogonale, i.e., $\Pi(U) \in O(3)$ tel que $\Pi(U) : \mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}' = \Pi(U)\mathbf{x}$.

Comme $SU(2)$ est connexe, U peut être déformée de façon continue en $\mathbb{1}_2$. Or, puisque l'application

$$\begin{aligned} \Pi : SU(2) &\rightarrow O(3) \\ U &\mapsto \Pi(U) , \end{aligned} \quad (1.87)$$

est continue, $\Pi(SU(2))$ est aussi connexe; en plus $\Pi(\mathbb{1}_2) = \mathbb{1}_3$. Donc $\Pi(U)$ est un élément de la composante de $O(3)$ qui contient l'identité, ce qui implique $\Pi(U) \in O(3)_0 = SO(3)$.

Pour illustrer ce propos, nous dérivons explicitement les composantes de $\Pi(U)$. Puisque il existe $\mathbf{x}' \in \mathbb{R}^3$ avec $X' = \tilde{x}'$, nous pouvons re-écrire Eq. (1.85) sous la forme

$$\tilde{x}' = U \tilde{x} U^* = U \tilde{x} U^{-1} \equiv \mathbf{x}' \cdot \boldsymbol{\sigma} . \quad (1.88)$$

La multiplication matricielle (1.88) donne

$$\begin{aligned} x'^1 &= \frac{1}{2}(\tilde{x}'_{21} + \tilde{x}'_{12}) \\ &= \frac{1}{2}(a^2 + \bar{a}^2 - b^2 - \bar{b}^2)x^1 + \frac{i}{2}(-a^2 + \bar{a}^2 - b^2 + \bar{b}^2)x^2 - (ab + \bar{a}\bar{b})x^3, \end{aligned} \quad (1.89)$$

$$\begin{aligned} x'^2 &= \frac{1}{2i}(\tilde{x}'_{21} - \tilde{x}'_{12}) \\ &= \frac{i}{2}(a^2 - \bar{a}^2 + b^2 - \bar{b}^2)x^1 + \frac{1}{2}(a^2 + \bar{a}^2 + b^2 + \bar{b}^2)x^2 + i(\bar{a}\bar{b} - ab)x^3, \end{aligned} \quad (1.90)$$

$$\begin{aligned} x'^3 &= \tilde{x}'_{11} = -\tilde{x}'_{22} \\ &= (\bar{a}b + a\bar{b})x^1 + i(\bar{a}b - a\bar{b})x^2 + (a\bar{a} - b\bar{b})x^3. \end{aligned} \quad (1.91)$$

Ceci peut être resumé dans la notation matricielle

$$\Pi \begin{pmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a^2 + \bar{a}^2 - b^2 - \bar{b}^2) & \frac{-i}{2}(a^2 - \bar{a}^2 + b^2 - \bar{b}^2) & -(ab + \bar{a}\bar{b}) \\ \frac{i}{2}(a^2 - \bar{a}^2 + b^2 - \bar{b}^2) & \frac{1}{2}(a^2 + \bar{a}^2 + b^2 + \bar{b}^2) & i(\bar{a}\bar{b} - ab) \\ (\bar{a}b + a\bar{b}) & i(\bar{a}b - a\bar{b}) & (a\bar{a} - b\bar{b}) \end{pmatrix} \quad (1.92)$$

D'après ces formules, il est évident qu'à chaque matrice $U \in SU(2)$ est associée une matrice $\Pi(U)$ qui transforme x^1, x^2, x^3 en x'^1, x'^2, x'^3 , i.e., $\mathbf{x}' = \Pi(U)\mathbf{x}$. Les éléments de $\Pi(U)$ sont explicitement donnés par éq. (1.92), et il est facile de vérifier que toutes les composantes de $\Pi(U)$ sont réelles. Comme nous l'avons démontré ci-dessus, $\Pi(U)$ est même une matrice orthogonale représentant une rotation propre des coordonnées, i.e., $\Pi(U) \in SO(3)$.

Avec éq. (1.92) on vérifie aisément que les matrices unitaires suivantes $\Pi(U_j(\alpha))$ correspondent bien aux rotations par d'un angle α autour de l'axe j .

- Si nous choisissons la matrice U diagonale, sa forme la plus générale est

$$U_3(\varphi) = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}. \quad (1.93)$$

En utilisant les formules générales (1.89)–(1.91), nous obtenons alors

$$\Pi(U_3(\varphi)) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.94)$$

ce qui correspond à la matrice de rotation de coordonnées d'un angle φ autour de l'axe 3.

- Si nous choisissons la matrice U réelle, sa forme la plus générale est

$$U_2(\beta) = \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix}. \quad (1.95)$$

En utilisant les formules générales (1.89)–(1.91), nous obtenons alors

$$\Pi(U_2(\beta)) = \begin{pmatrix} \cos(\beta) & 0 & \sin(\beta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\beta) & 0 & \cos(\beta) \end{pmatrix}, \quad (1.96)$$

ce qui décrit une rotation de coordonnées d'un angle β autour de l'axe 2.

- Finalement, si nous choisissons la matrice U telle que

$$U_1(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) & -i \sin(\alpha/2) \\ -i \sin(\alpha/2) & \cos(\alpha/2) \end{pmatrix}, \quad (1.97)$$

nous obtenons

$$\Pi(U_1(\alpha)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) \\ 0 & \sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{pmatrix}, \quad (1.98)$$

ce qui décrit une rotation de coordonnées d'un angle α autour de l'axe 1.

c) $\Pi : SU(2) \rightarrow SO(3)$ est surjective et $\ker(\Pi) = \{\mathbb{I}_2, -\mathbb{I}_2\}$

Nous venons de vérifier que $\Pi(U_1(\alpha))$, $\Pi(U_2(\beta))$ et $\Pi(U_3(\varphi))$ sont bien des rotations autour des axes 1, 2, 3, avec les angles α, β, φ , respectivement. Ainsi, à partir de $\Pi(U_1(\alpha))$, $\Pi(U_2(\beta))$ et $\Pi(U_3(\varphi))$, on peut construire toute rotation et Π est alors surjective. Il est évident que $U \mapsto \Pi(U)$ est un homomorphisme de groupe, c'est-à-dire $\Pi(UV) = \Pi(U)\Pi(V)$ pour $U, V \in SU(2)$. Nous voulons trouver le noyau de cet homomorphisme :

$$\ker(\Pi) = \{U \in SU(2) \mid U\tilde{x}U^* = \tilde{x}, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3\}. \quad (1.99)$$

On voit immédiatement que $\{\mathbb{I}_2, -\mathbb{I}_2\} \subset \ker(\Pi)$, ce qui indique que deux éléments U et $-U$ de $SU(2)$ sont associés à chaque $S \in SO(3)$. Nous devons encore montrer qu'il n'existe pas d'autres éléments de $SU(2)$ qui sont appliqués sur \mathbb{I}_3 , i.e. que,

$$\ker(\Pi) = \{\mathbb{I}_2, -\mathbb{I}_2\}. \quad (1.100)$$

Une matrice $X \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ quelconque peut être représentée sous la forme

$$X = \alpha \mathbb{I}_2 + \tilde{x} + i(\beta \mathbb{I}_2 + \tilde{y}). \quad (1.101)$$

Pour $U \in \ker(\Pi)$, on a donc $UXU^* = X$ ou $UX = XU$ pour toute matrice $X \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$. Or, d'après le Lemme de Schur, les seules matrices qui commutent avec toutes les autres sont les multiples de l'unité, $U = \lambda \mathbb{I}_2$. Ainsi, on a bien $\ker(\Pi) \equiv \{\mathbb{I}_2, -\mathbb{I}_2\}$, ce qui implique que $SO(3) \cong SU(2)/\{\mathbb{I}_2, -\mathbb{I}_2\}$.

Ensembles, les points **a)**, **b)** et **c)** démontrent que $SU(2)$ est le recouvrement universel de $SO(3)$, ce que l'on dénote souvent par $SU(2) = \overline{SO(3)}$. L'application de recouvrement est

$$\begin{aligned} \Pi : SU(2) &\rightarrow SO(3) \\ U &\mapsto \Pi(U) \equiv \Pi(U). \end{aligned} \quad (1.102)$$

L'homomorphisme de $SU(2)$ en $SO(3)$ est de type 2 : 1, i.e., deux matrices de $SU(2)$, U et $-U$, sont associées à la même rotation, $\Pi(U) = \Pi(-U)$. Finalement, comme Π est un isomorphisme local, il induit un isomorphisme des algèbres de Lie, $\Pi_* : su(2) \rightarrow so(3)$.

Algèbre de Lie

Nous voulons maintenant démontrer que

$$\Pi_*(M_j) = I_j \quad \text{avec} \quad M_j = \frac{1}{2i}\sigma_j, \quad j = 1, 2, 3. \quad (1.103)$$

Evidemment, les M_j forment une base de $su(2)$ (exercice). Soit encore $U_k(\alpha) = \exp(\alpha M_k)$, le sous-groupe à un paramètre généré par M_k . On a alors

$$M_k = \left. \frac{d}{d\alpha} U_k(\alpha) \right|_{\alpha=0}. \quad (1.104)$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \Pi_* \widetilde{(M_k)} \mathbf{x} &= \left. \frac{d}{d\alpha} \Pi(U_k(\alpha)) \mathbf{x} \right|_{\alpha=0} \\ &= \left. \frac{d}{d\alpha} [U_k(\alpha) \tilde{x} U_k^*(\alpha)] \right|_{\alpha=0} = M_k \tilde{x} + \tilde{x}(-M_k) \\ &= [M_k, \tilde{x}] = \frac{1}{2i} \sum_j [\sigma_k, \sigma_j] x^j = \sum_{j,i} \epsilon_{kji} \sigma_i x^j, \end{aligned} \quad (1.105)$$

puisque $\tilde{x} = \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ et

$$[\sigma_k, \sigma_j] = 2i \sum_i \epsilon_{kji} \sigma_i. \quad (1.106)$$

D'autre part, le côté gauche de Eq. (1.105) devient

$$\Pi_* \widetilde{(M_k)} \mathbf{x} = \sum_{j,i} (\Pi_*(M_k))_{ij} x^j \sigma_i, \quad (1.107)$$

ce qui implique finalement l'identité $(\Pi_*(M_k))_{ij} = \epsilon_{kji} = -\epsilon_{kij} = (I_k)_{ij}$. D'après Eqs. (1.103) et (1.106), les relations de commutation des M_k sont

$$[M_i, M_j] = \sum_k \epsilon_{ijk} M_k. \quad (1.108)$$

Elles sont donc identiques à celles des I_k , ce qui doit être le cas puisque Π_* est un isomorphisme entre les algèbres de Lie $su(2)$ et $so(3)$. En plus, comme $su(2)$ et $so(3)$ sont isomorphes, ils ont les mêmes représentations irréductibles : à la représentation \mathcal{D}_*^j de $so(3)$ correspond la représentation $\mathcal{D}_*^j \circ \Pi_*$ de $su(2)$. Pour un groupe simplement connexe, on peut montrer qu'à chaque représentation de l'algèbre de Lie correspond une représentation du groupe. Il existe donc aussi des représentations \mathcal{D}^j de $SU(2)$ pour des j demi-entiers. Les particules à spin demi-entier, les fermions, e.g. l'électron, se transforment d'après ces représentations. L'existence des fermions est donc un phénomène purement quantique, qui n'a pas d'analogue en physique classique.

1.5 Série de Clebsch-Gordan et le caractère d'une représentation

1.5.1 Preuve intuitive du théorème de Clebsch-Gordan

En physique, nous considérons souvent la combinaison de deux systèmes (deux électrons autour un noyau dans un atome, *etc.*). Celle-ci est décrite par

(une partie du) le produit tensoriel des espace de Hilbert des deux systèmes. Si le premier système porte la représentation \mathcal{D}^{j_1} et le deuxième la représentation \mathcal{D}^{j_2} , le système combiné porte la représentation $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$. Si l'hamiltonien est invariant sous rotation, les niveaux d'énergie sont dégénérés dans les sous-espaces qui portent une représentation irréductible de $SU(2)$. Il est alors essentiel de trouver la décomposition irréductible du produit tensoriel $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$ de deux représentations irréductibles, i.e., $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2} \simeq \bigoplus_j m_j \mathcal{D}^j$. Ici nous démontrons que

$$\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2} = \bigoplus_{j=|j_1-j_2|}^{|j_1+j_2|} \mathcal{D}^j \quad \text{série de Clebsch-Gordan.} \quad (1.109)$$

Preuve : Soient $\mathcal{V}^{(j_1)}$ et $\mathcal{V}^{(j_2)}$ deux espaces qui portent les représentations \mathcal{D}^{j_1} et \mathcal{D}^{j_2} du groupe $SU(2)$. L'espace $\mathcal{V}^{(j_1)} \otimes \mathcal{V}^{(j_2)}$ porte alors $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$. Soient $(\phi_m^{(j_1)})$ et $(\psi_m^{(j_2)})$ des bases canoniques de $\mathcal{V}^{(j_1)}$ et $\mathcal{V}^{(j_2)}$. Donc les états $(\phi_{m_1}^{(j_1)} \otimes \psi_{m_2}^{(j_2)})$ forment une base de $\mathcal{V}^{(j_1)} \otimes \mathcal{V}^{(j_2)}$. Pour calculer la valeur de L_3 sur ces états nous utilisons

$$\begin{aligned} L_3^{(j_1 \otimes j_2)} &\equiv i\hbar (\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2})_* (I_3) = i\hbar \left. \frac{d}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} (\mathcal{D}^{j_1}(R_3(\alpha)) \otimes \mathcal{D}^{j_2}(R_3(\alpha))) \\ &= \left(L_3^{(j_1)} \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes L_3^{(j_2)} \right), \end{aligned}$$

ou $R_3(\alpha)$ signifie la rotation avec angle α autour de l'axe \mathbf{e}_3 . Les superscripts de L_3 indiquent dans quelle espace l'opérateur L_3 vit. Ils sont supprimés par la suite. Pour nos états de base ceci donne

$$L_3 \phi_{m_1}^{(j_1)} \otimes \psi_{m_2}^{(j_2)} = \hbar(m_1 + m_2) \phi_{m_1}^{(j_1)} \otimes \psi_{m_2}^{(j_2)}.$$

Donc l'état de base avec valeur propre de L_3 maximale est $\phi_{j_1}^{(j_1)} \otimes \psi_{j_2}^{(j_2)}$ avec valeur propre $\hbar(j_1 + j_2)$. Tous les autres états ont des valeurs propres inférieures. Donc $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$ contient $\mathcal{D}^{j_1+j_2}$ une et une seule fois.

En plus, l'espace des états avec valeur propre $\hbar(j_1 + j_2 - 1)$ est bi-dimensionnel avec base $\phi_{j_1-1}^{(j_1)} \otimes \psi_{j_2}^{(j_2)}$ et $\phi_{j_1}^{(j_1)} \otimes \psi_{j_2-1}^{(j_2)}$. Un de ces états contribue à la représentation $\mathcal{D}^{j_1+j_2}$, mais l'autre doit faire partie d'une représentation $\mathcal{D}^{j_1+j_2-1}$, qui doit aussi être présente une et une seule fois. Ça continue ce cette façon (voir figure 1.1) et une après l'autre, la dimension de l'espace propre avec valeur propre $\hbar(j_1 + j_2 - k)$ de L_3 augmente par 1 et la représentation $j = j_1 + j_2 - k$ doit être présente une seule fois, jusqu'à $k = k_{\text{lim}} = 2 \min(j_1, j_2)$. Pour $k > k_{\text{lim}}$ la dimension de l'espace propre avec valeur propre $\hbar(j_1 + j_2 - k)$ reste constante pendant $2|j_1 - j_2|$ pas, pendant lesquelles m descend de $\hbar|j_1 - j_2|$ jusqu'à $-\hbar|j_1 - j_2|$, et aucune nouvelle représentation est possible (voir figure 1.1). Après, la dimension commence à décroître un par un. La dernière représentation est donc celle avec $j = j_1 + j_2 - k_{\text{lim}} = |j_1 - j_2|$. Ceci complète la démonstration. \square

Comme nous l'avons dit, la série de Clebsch-Gordan est très importante en Mécanique Quantique. Comme illustration nous considérons deux systèmes avec des hamiltoniens H_1 et H_2 invariants sous rotation sur des espace de Hilbert \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_2 . Nous supposons que les états fondamentaux de ces systèmes portent

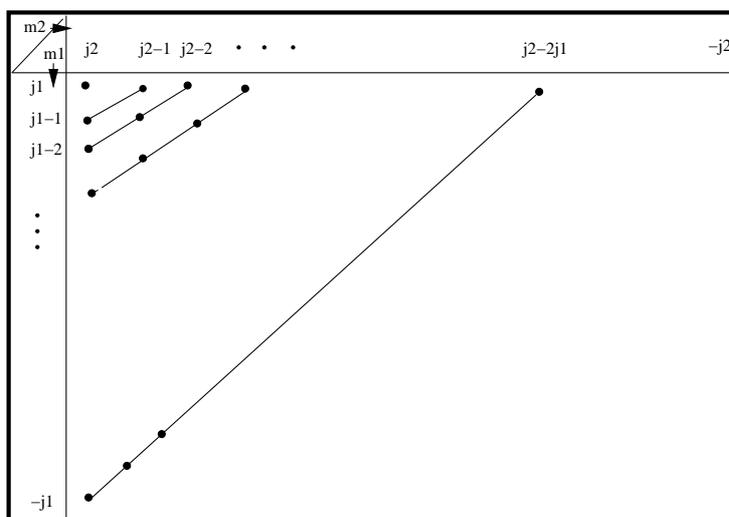


FIG. 1.1 – Une table pour les valeurs propres possibles de L_3 pour $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$. Dans l'exemple présenté, $j_1 < j_2$. Le long des diagonales indiquées, la valeur est $m = j_1 + j_2 - k$, avec $k = 0$ pour le point tout en haut et $k = k_{\text{lim}} = 2j_1$ pour la diagonale la plus basse.

les représentations irréductibles \mathcal{D}^{j_1} et \mathcal{D}^{j_2} de $SU(2)$ sur des sous-espaces $\mathcal{E}^{j_1} \subset \mathcal{H}_1$ et $\mathcal{E}^{j_2} \subset \mathcal{H}_2$. Si nous ajoutons maintenant une interaction H_{int} entre ces deux systèmes, les moments cinétiques $\mathbf{J}^{(1)}$ et $\mathbf{J}^{(2)}$ ne seront plus conservés individuellement, mais leur somme $\mathbf{J} = \mathbf{J}^{(1)} + \mathbf{J}^{(2)}$ sera conservée. Et (si la perturbation H_{int} est petite) on a

$$(\mathcal{E}, \mathcal{D}) = (\mathcal{E}^{j_1} \otimes \mathcal{E}^{j_2}, \mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}) = \bigoplus_{j=|j_1-j_2|}^{|j_1+j_2|} (\mathcal{E}^j, \mathcal{D}^j), \quad (1.110)$$

et tous les sous-espaces linéaires \mathcal{E}^j possèdent en général des énergies légèrement différentes (séparation des niveaux d'énergie).

Dans la suite de cette section je donne une preuve plus formelle pour (1.109), qui a besoin de plusieurs outils de la théorie de groupe qui ne sont pas développés dans ce cours. Cette partie s'adresse d'abord aux étudiants en physique théorique qui auront de toute façon besoin d'un cours/livre sur la théorie de groupe ou les notions utilisées ici sont traitées.

1.5.2 Le caractère

En physique, les opérations (transformations) de symétrie peuvent souvent être considérées comme les éléments d'un groupe. Une matrice A est alors la représentation d'une telle transformation dans un système de coordonnées donné. Sous un changement de coordonnées, donné par une matrice X , A est transformée en $B = X^{-1}AX$. Des résultats physiques ne dépendent en général pas du système de coordonnées choisi. Ceci motive la notion de *classe de conjugaison*.

Définition 1.5.1 Soient A, A' deux éléments d'un groupe G . Les éléments A et A' sont conjugués l'un de l'autre si, pour un $X \in G$, on a

$$A' = XAX^{-1} \quad \text{et donc} \quad A = X^{-1}A'X . \quad (1.111)$$

Il est évident que l'opération "conjugué" est une relation d'équivalence (si A est conjugué de A' , alors A' est aussi conjugué de A , et si en plus A' est conjugué de A'' , alors A est aussi conjugué de A''). Ainsi, nous pouvons collectionner tous les éléments mutuellement conjugués dans une classe d'éléments et les différentes classes de conjugaison n'ont pas d'élément communs. Si les éléments du groupe sont représentés par des matrices, l'opération de conjugaison définie par Eq. (1.111), aussi appelée "transformation de similitude", laisse la trace invariante. Il s'ensuit que tous les éléments d'une classe de conjugaison possèdent la même trace. Ceci motive la définition du caractère d'une représentation.

Définition 1.5.2 Soit G un groupe et \mathcal{D} une représentation de dimension finie,

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &: G \rightarrow \text{iso}(\mathcal{H}) \\ U &\mapsto \mathcal{D}(U) . \end{aligned} \quad (1.112)$$

Nous définissons le caractère de la représentation \mathcal{D} par

$$\begin{aligned} \chi_{\mathcal{D}} &: G \rightarrow \mathbb{C} \\ U &\mapsto \text{tr}(\mathcal{D}(U)) . \end{aligned} \quad (1.113)$$

Le caractère d'une représentation est une fonction (complexe) sur le groupe G . Il ne dépend que de la classe de conjugaison de l'élément U . De plus, nous rappelons que deux représentations \mathcal{D} et \mathcal{D}' sont équivalentes si elles ont la même dimension et si chaque matrice $\mathcal{D}'(U)$ est conjuguée à $\mathcal{D}(U)$. Explicitement, il existe une transformation linéaire T avec

$$\mathcal{D}'(U) = T\mathcal{D}(U)T^{-1} , \quad \forall U \in G . \quad (1.114)$$

On écrit alors symboliquement $\mathcal{D}' \simeq \mathcal{D}$. D'après la définition (1.113), nous avons donc

$$\chi_{\mathcal{D}'}(U) = \text{tr}(\mathcal{D}'(U)) = \text{tr}(T\mathcal{D}(U)T^{-1}) = \text{tr}(\mathcal{D}(U)) = \chi_{\mathcal{D}}(U) . \quad (1.115)$$

Nous donnons encore deux propriétés importantes du caractère d'une représentation sans démonstration. Si G est compact, les caractères $\chi_{\mathcal{D}}$ et $\chi_{\mathcal{D}'}$ de deux représentations irréductibles inéquivalentes sont orthogonaux par rapport au produit scalaire,

$$\int_G dU \bar{\chi}_{\mathcal{D}}(U) \chi_{\mathcal{D}'}(U) = 0 , \quad (1.116)$$

tandis que $\chi_{\mathcal{D}}(U) \equiv \chi_{\mathcal{D}'}(U)$ si les représentations sont équivalentes. De plus, pour une représentation irréductible, on a

$$\int_G dU |\chi_{\mathcal{D}}(U)|^2 = 1 . \quad (1.117)$$

(Sur les groupes compacts, il existe une intégration invariante, l'intégration de Haar. C'est celle-ci que nous dénotons ici simplement $\int_G dU$. Nous la discuterons en détails dans le cours [7]). Le concept du caractère d'une représentation, $\chi_{\mathcal{D}}$, joue un rôle important dans la théorie des représentations. Pour des groupes compacts, le caractère est l'instrument décisif pour établir la complétude d'un ensemble de représentations irréductibles ; il permet de juger si toutes les représentations ont été trouvées [4].

Caractère de $SU(2)$

La classe de conjugaison de $SU(2)$ se détermine de la manière suivante. Pour $U' \in SU(2)$, il existe toujours une matrice $V \in SU(2)$ telle que

$$U' = VU(\alpha)V^{-1} \quad \text{où} \quad U(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha} \end{pmatrix} = U_3(2\alpha) . \quad (1.118)$$

Il s'ensuit que chaque classe de conjugaison peut être représentée par une matrice de la forme de $U(\alpha)$. En plus, si on choisit

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} , \quad (1.119)$$

nous obtenons $U'(\alpha) = VU(\alpha)V^{-1} = U(-\alpha)$, i.e., $\chi_{\mathcal{D}}(U(-\alpha)) = \chi_{\mathcal{D}}(U(\alpha))$.

Dans le cours [7] nous montrerons que l'intégration invariante de $SU(2)$ sur les classes est donnée par $\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \sin(\alpha)^2$. Donc \mathcal{D} est une représentation irréductible de $SU(2)$ si et seulement si

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \sin(\alpha)^2 |\chi_{\mathcal{D}}(U(\alpha))|^2 = 1 . \quad (1.120)$$

De plus, si \mathcal{D} et \mathcal{D}' sont deux représentations inéquivalentes de $SU(2)$, alors

$$\int_0^{2\pi} d\alpha \sin(\alpha)^2 \bar{\chi}_{\mathcal{D}}(U(\alpha)) \chi_{\mathcal{D}'}(U(\alpha)) = 0 . \quad (1.121)$$

Dans la section 1.2 nous avons vu que les représentations irréductibles de l'algèbre de Lie $su(2) \equiv so(3)$ sont données par les $\mathcal{D}_*^j, \forall j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\}$. Pour un groupe simplement connexe, toute représentation de son algèbre de Lie peut être élevée à une représentation du groupe. Pour $j \in \mathbb{N}$, ce sont les représentations \mathcal{D}^j de $SO(3)$ que nous avons trouvées dans la section 1.2. Plus précisément, $\mathcal{D}^j(U) = \mathcal{D}^j(\Pi(U))$. D'après nos résultats de la section 1.2, la dimension de \mathcal{D}_*^j (et donc aussi de \mathcal{D}^j) est $2j + 1$. Pour de pures raisons dimensionnelles, il s'ensuit que

- $\mathcal{D}^0(U) = 1$: \mathcal{D}^0 est la représentation triviale ; cela signifie qu'un état quantique sans moment angulaire (un état s) est invariant sous rotation.
- $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}(U) = U$: $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ est l'identité .
- $\mathcal{D}^1(U) = \mathcal{D}^1(\Pi(U)) = \Pi(U)$.

Nous dériverons des représentations explicites pour les \mathcal{D}^j sur $SU(2)$ pour tout demi-entier j dans les exercices.

Comme pour $SO(3)$, nous posons maintenant $\mathbf{J} = i\hbar\mathcal{D}_*^j(\mathbf{M}) = \frac{1}{2}i\hbar\mathcal{D}_*^j(-i\boldsymbol{\sigma})$. Soit $(\Psi_m^j)_{m=-j}^j$ une base de l'espace linéaire \mathcal{E}^j qui diagonalise \mathbf{J}^2 et J_3 . Il suit alors (voir section 1.2)

$$J_3\Psi_m^j = \hbar m\Psi_m^j, \quad (1.122)$$

$$\mathbf{J}^2\Psi_m^j = \hbar^2 j(j+1)\Psi_m^j. \quad (1.123)$$

Avec $J_{\pm} := J_1 \pm iJ_2$, nous avons $\mathbf{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 = J_-J_+ + \hbar J_3 + J_3^2$, et

$$J_{\pm}\Psi_m^j = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\Psi_{m\pm 1}^j. \quad (1.124)$$

\mathbf{J}^2 est un multiple de l'identité sur \mathcal{E}^j .

Pour un groupe compact, toutes les représentations irréductibles ont une dimension finie et elles peuvent être choisies *unitaires*.

Nous considérons

$$M_3 = \left. \frac{d}{d\alpha} U_3(\alpha) \right|_{\alpha=0} \quad \text{où} \quad U_3(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} = U(\alpha/2). \quad (1.125)$$

Ceci implique

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^j(U(\alpha/2)) &= \mathcal{D}^j(U_3(\alpha)) = \mathcal{D}^j(\exp(\alpha M_3)) \\ &= \exp(\alpha \mathcal{D}_*^j(M_3)) = \exp\left(\frac{\alpha}{i\hbar} J_3\right), \end{aligned} \quad (1.126)$$

et on obtient $\mathcal{D}^j(U(\alpha))\Psi_m^j = \mathcal{D}^j(U_3(2\alpha))\Psi_m^j = e^{-i2\alpha m}\Psi_m^j$. Dans la base $(\Psi_m^j)_{m=-j}^j$ on a alors

$$\mathcal{D}^j(U(\alpha)) = \begin{pmatrix} e^{-2i\alpha j} & & & \\ & e^{-2i\alpha(j-1)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{2i\alpha j} \end{pmatrix}. \quad (1.127)$$

Le caractère de la représentation \mathcal{D}^j est donc

$$\chi_j(U(\alpha)) = \sum_{m=-j}^j e^{i2\alpha m} = \frac{e^{i(2j+1)\alpha} - e^{-i(2j+1)\alpha}}{e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}} = \frac{\sin([2j+1]\alpha)}{\sin(\alpha)}, \quad (1.128)$$

puisque c'est une série géométrique. De Eq. (1.120)–(1.121), il suit que

$$\int_{SU(2)} dU |\chi_j(U)|^2 = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \sin([2j+1]\alpha)^2 = 1, \quad \text{et} \quad (1.129)$$

$$\int_{SU(2)} dU \bar{\chi}_j(U)\chi_{j'}(U) = \int_0^{2\pi} d\alpha \sin([2j+1]\alpha) \sin([2j'+1]\alpha) = 0 \quad (1.130)$$

pour $j \neq j'$.

1.5.3 Décomposition en représentations irréductibles et addition de moments cinétiques

Soit \mathcal{E} un espace linéaire qui porte une représentation \mathcal{D} de $SU(2)$. Nous aimerions décomposer \mathcal{D} en représentations irréductibles \mathcal{D}^j . Explicitement, nous désirons déterminer les coefficients m_j tels que

$$(\mathcal{E}, \mathcal{D}) \simeq \bigoplus_{j=1}^N m_j (\mathcal{E}^j, \mathcal{D}^j), \quad (1.131)$$

où \simeq indique que la décomposition en parties irréductibles est unique à une transformation d'équivalence près (Théorème d'unicité). Ceci implique que le caractère de la représentation \mathcal{D} satisfait

$$\chi_{\mathcal{D}} = \sum_{j=1}^N m_j \chi_j, \quad (1.132)$$

où χ_j est le caractère de la représentation irréductible \mathcal{D}^j . Le coefficient m_j spécifie donc la multiplicité de la représentation \mathcal{D}^j dans la décomposition de \mathcal{D} . En combinant Eqs. (1.120) et (1.132), nous obtenons

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \sin(\alpha)^2 |\chi_{\mathcal{D}}(\alpha)|^2 = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \sin(\alpha)^2 \sum_{j=1}^N m_j^2 |\chi_j(\alpha)|^2 = \sum_{j=1}^N m_j^2. \quad (1.133)$$

De plus,

$$m_j = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \sin(\alpha)^2 \bar{\chi}_{\mathcal{D}}(\alpha) \chi_j(\alpha). \quad (1.134)$$

On peut en conclure que la multiplicité m_j de la représentation \mathcal{D}^j est entièrement spécifiée par le caractère.

Il est facile de voir que le caractère correspondant au produit tensoriel de deux représentations est le produit des caractères χ_{j_1} et χ_{j_2} . Si $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2} \simeq \bigoplus_j m_j \mathcal{D}^j$ nous avons donc $\chi_{j_1} \chi_{j_2} = \sum_j m_j \chi_j$. D'autre part, on trouve (exercice)

$$\chi_{j_1}(\alpha) \chi_{j_2}(\alpha) = \sum_{m_1, m_2} e^{2i(m_1+m_2)\alpha} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{|j_1+j_2|} \sum_{m=-j}^j e^{2im\alpha} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{|j_1+j_2|} \chi_j(\alpha). \quad (1.135)$$

Ainsi, $\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2}$ contient *une seule fois* chacune des représentations \mathcal{D}^j , où $|j_1 - j_2| \leq j \leq |j_1 + j_2|$. Ceci mène de nouveau à la série de Clebsch-Gordan :

$$\mathcal{D}^{j_1} \otimes \mathcal{D}^{j_2} = \bigoplus_{j=|j_1-j_2|}^{|j_1+j_2|} \mathcal{D}^j. \quad (1.136)$$

1.6 Particules avec spin, l'équation de Pauli

Pour décrire une particule de charge q avec spin s , i.e., une particule qui possède un "moment cinétique intrinsèque", il faut considérer une fonction d'onde

à plusieurs composantes, $\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^r = \mathcal{H}$,

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \Psi_r(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (1.137)$$

Sous une rotation $R \in SO(3)$, $\Psi(\mathbf{x})$ se transforme suivant

$$\Psi(\mathbf{x}) \mapsto [\mathcal{U}(R)\Psi](\mathbf{x}) = S(R)\Psi(R^{-1}\mathbf{x}), \quad (1.138)$$

où $S(R) \in U(r)$ agit sur les composantes de $\Psi(\mathbf{x})$. S est une *représentation projective* de $SO(3)$, i.e.,

$$S(R_1)S(R_2) = \pm S(R_1R_2). \quad (1.139)$$

D'après le dernier paragraphe, S peut être "élevée" à une représentation ordinaire \tilde{S} de $SU(2)$ telle que

$$\mathcal{U}(A) = \mathcal{V}(\Pi(A)) \otimes \tilde{S}(A), \quad A \in SU(2). \quad (1.140)$$

\mathcal{V} agit sur $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ et $\tilde{S}(A)$ agit sur \mathbb{C}^r . Pour $R = \Pi(A)$ et $\Phi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, nous avons

$$[\mathcal{V}(R)\Phi](\mathbf{x}) = \Phi(R^{-1}\mathbf{x}). \quad (1.141)$$

Le moment cinétique total est alors

$$\mathbf{J} = i\hbar\mathcal{U}_*(\mathbf{M}) = \mathbf{L} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{S}. \quad (1.142)$$

Ici $\mathbf{L} = i\hbar\mathcal{V}_*(I)$ est le moment cinétique orbital, tandis que le spin est

$$\mathbf{S} = i\hbar\tilde{S}_*(\mathbf{M}) = \frac{\hbar}{2}\tilde{S}_*(\boldsymbol{\sigma}). \quad (1.143)$$

Les règles de commutation des composantes S_k sont évidemment les mêmes que celles pour les L_k , les $i\hbar I_k$, ou les $\frac{\hbar}{2}\sigma_k$.

Pour un système qui est invariant sous rotation, en général seul le moment cinétique total, \mathbf{J} , est conservé.

Pour des particules élémentaires, nous supposons que la représentation \tilde{S} sur \mathbb{C}^r est irréductible. Donc $\tilde{S} = \mathcal{D}^s$, $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ et $r = 2s + 1$. Le nombre s est appelé le spin de la particule et, d'après Eq. (1.143), on a

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\mathcal{D}_*^s(\boldsymbol{\sigma}). \quad (1.144)$$

A ce jour, seules des particules élémentaires de spin $\frac{1}{2}$, 1 et 2 ont été détectées dans la nature :

- $s = \frac{1}{2}$: les fermions (électrons, quarks).
- $s = 1$: les bosons de jauge (γ , Z , W^\pm , gluons).
- $s = 2$: le graviton (à ce jour détecté seulement de façon indirecte).

Toutes les autres particules observées (les méson π_0 , η_0 , K_0 etc. avec spin 0, les baryons Δ , Λ , etc., avec spin $\frac{3}{2}$, $\frac{5}{2}$, \dots , les mésons η_2 , f_2 avec spin 2, etc.) sont des composites comme le neutron et le proton. Dans le modèle standard, la seule particule avec $s = 0$ est le boson de Higgs ; à noter qu'il n'a pas encore été détecté expérimentalement.

La première mise en évidence du spin $s = \frac{1}{2}$ de l'électron vient du spectre des atomes alcalins (ceux qui n'ont qu'un seul électron dans la couche supérieure). Ceux-ci ont deux niveaux d'énergie très proches pour les états avec $\ell \neq 0$. Si $s = \frac{1}{2}$, ceci s'explique avec la "quasi"-dégénérescence des états dans les deux représentations,

$$\mathcal{D}^\ell \otimes \mathcal{D}^{\frac{1}{2}} = \mathcal{D}^{\ell+\frac{1}{2}} \oplus \mathcal{D}^{\ell-\frac{1}{2}} = \mathcal{D}^{j+} \oplus \mathcal{D}^{j-} , \quad j_{\pm} = \ell \pm \frac{1}{2} . \quad (1.145)$$

Le couplage spin-orbite divise (comme nous le verrons par la suite) le niveau d'énergie $\mathcal{D}^\ell \otimes \mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$ en deux niveaux d'énergie légèrement différents, $\mathcal{D}^{\ell+\frac{1}{2}}$ et $\mathcal{D}^{\ell-\frac{1}{2}}$ (sauf si $\ell = 0$ et $j = s = \frac{1}{2}$).

Pour la fonction d'onde d'un électron, nous écrivons

$$\Psi(t, \mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \Psi_+(t, \mathbf{x}) \\ \Psi_-(t, \mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow}(t, \mathbf{x}) \\ \Psi_{\downarrow}(t, \mathbf{x}) \end{pmatrix} , \quad (1.146)$$

où nous choisissons la base telle que S_3 est diagonale. D'après Eq. (1.144), nous avons donc

$$S_3 \Psi = \frac{\hbar}{2} \mathcal{D}_*^{\frac{1}{2}} (\sigma_3) \Psi = \frac{\hbar}{2} \sigma_3 \Psi = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} +\Psi_+ \\ -\Psi_- \end{pmatrix} . \quad (1.147)$$

Ceci nous permet d'interpréter $|\Psi_{\pm}(t, \mathbf{x})|^2$ comme la densité de probabilité pour avoir $S_3 = \pm \frac{\hbar}{2}$.

Quelle est l'équation de Schrödinger pour l'électron ? Comme l'hamiltonien H induit l'évolution temporelle, l'équation doit être de la forme

$$i\hbar \partial_t \Psi = H \Psi . \quad (1.148)$$

Nous considérons un électron ($q_e = e < 0$, $m = m_e$) plongé dans un champ électromagnétique caractérisé par le champ électrique $\mathbf{E}(t, \mathbf{x})$ et le champ magnétique $\mathbf{B}(t, \mathbf{x})$. Les champs \mathbf{E} et \mathbf{B} peuvent être décrits par un potentiel scalaire $\phi(t, \mathbf{x})$ et un potentiel vecteur $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ tels que $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$ et $\mathbf{E} + \partial_t \mathbf{A} = -\nabla \phi$. La partie orbitale de l'hamiltonien est alors donnée par

$$H_o = \frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V , \quad [\mathbf{p} \equiv -i\hbar \nabla] \quad (1.149)$$

où $V(t, \mathbf{x}) = e\phi$ est l'énergie du potentiel électrostatique. Pour un champ magnétique homogène et constant, nous pouvons écrire $\mathbf{A} = \frac{1}{2} (\mathbf{B} \wedge \mathbf{x})$ (dans la jauge de Coulomb) et donc

$$\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 = \mathbf{p}^2 - \frac{e}{c} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2 , \quad (1.150)$$

$$\frac{2i\hbar e}{c} \mathbf{A} \cdot \nabla = \frac{i\hbar e}{c} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{x} \wedge \nabla) = -\frac{e}{c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} , \quad (1.151)$$

où $\mathbf{L} = -i\hbar (\mathbf{x} \wedge \nabla) = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$ est le moment cinétique associé à l'électron. Dans les phénomènes que nous allons étudier, la contribution du troisième terme de Eq. (1.150) est souvent négligeable, et nous pouvons poser

$$H_o = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{e}{2m_e c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} + V . \quad (1.152)$$

(Ici nous avons utilisé que dans la jauge de Coulomb, $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, ce qui implique que $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$.) Ainsi, en circulant sur son orbite, l'électron induit un moment magnétique proportionnel au moment cinétique orbital,

$$\boldsymbol{\mu}_e^{(o)} = \frac{e}{2m_e c} \mathbf{L}. \quad (1.153)$$

Le facteur de proportionnalité $e/(2m_e c)$ est appelé le *rapport gyromagnétique*. En présence d'un champ magnétique constant, l'énergie de l'atome diffère donc d'un terme magnétique, $-\boldsymbol{\mu}_e^{(o)} \cdot \mathbf{B}$.

Nous voulons encore ajouter un terme provenant du spin de l'électron, H_s . Par analogie avec ce qui précède, on peut supposer que le moment cinétique intrinsèque \mathbf{S} est aussi proportionnel à un moment magnétique $\boldsymbol{\mu}_e^{(s)}$. Ainsi, nous posons

$$\boldsymbol{\mu}_e^{(s)} = g \frac{e}{2m_e c} \mathbf{S}, \quad (1.154)$$

où g est une constante ajustable, le *facteur g de Landé*. Par analogie avec la partie orbitale, l'énergie du moment magnétique $\boldsymbol{\mu}_e^{(s)}$ dans un champ magnétique \mathbf{B} est

$$H_s = -\boldsymbol{\mu}_e^{(s)} \cdot \mathbf{B} = -g \frac{e}{2m_e c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = -\frac{g}{2} \frac{e\hbar}{2m_e c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \frac{g}{2} \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (1.155)$$

où nous avons défini μ_B , le **magnéton de Bohr** de l'électron,

$$\mu_B := \frac{|e|\hbar}{2m_e c} \simeq 5.788 \cdot 10^{-9} \frac{\text{eV}}{\text{Gauss}} \simeq 9.274 \cdot 10^{-24} \frac{\text{Joule}}{\text{Tesla}}. \quad (1.156)$$

L'analyse de l'effet Zeeman montre que $g \simeq 2$. La valeur $g = 2$ sera dérivée explicitement à l'aide de la théorie relativiste de Dirac pour l'électron dans le chapitre 4. Finalement, l'électrodynamique quantique (cf. [9]) permet de calculer les petites déviations ($g - 2$). Ces déviations ont été mesurées avec une très haute précision (12 décimales!) et sont en parfait accord avec le calcul théorique : $g = 2(1 + 1.1596389 \times 10^{-3})$.

Les expériences montrent que les nucléons, protons et neutrons possèdent aussi un spin $\frac{1}{2}$. Ce dernier est observé indirectement par la mesure du moment magnétique qui lui est associé. Si $\boldsymbol{\mu}_x^{(s)}$, \mathbf{S}_x , q_x et m_x désignent, respectivement, le moment magnétique, le spin, la charge et la masse d'une particule x , nous avons alors $\boldsymbol{\mu}_x^{(s)} = g_x \frac{q_x}{2m_x c} \mathbf{S}_x$, ce qui donne $g_p = 5.59$ pour le proton ($q_p = -e$) et $g_n = -3.83$ pour le neutron (pour le neutron, nous considérons le magnéton de Bohr du proton). Pour l'instant, ces valeurs numériques sont bizarres et incompréhensibles. Mais, comme les protons et neutrons sont des états composés de quarks, il devrait être possible, en principe, de calculer g_n et g_p à partir de la chromodynamique quantique...

Pour $g = 2$, nous obtenons l'*équation de Pauli* pour un électron :

$$\boxed{i\hbar \partial_t \Psi = \left[\frac{1}{2m_e} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V - \frac{e\hbar}{2m_e c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \Psi} \quad (1.157)$$

De cette équation, nous pouvons déduire une équation de continuité (comme

dans le cas des particules sans spin). En posant

$$\rho = e\Psi^*\Psi = e\left(|\Psi_\uparrow|^2 + |\Psi_\downarrow|^2\right), \quad (1.158)$$

$$\mathbf{J}_c = \frac{e\hbar}{2im_e}\left(\Psi^*\nabla\Psi - (\nabla\Psi^*)\Psi\right) - \frac{e^2}{m_e c}\Psi^*\Psi\mathbf{A}, \quad (1.159)$$

il suit (exercice)

$$\partial_t\rho + \nabla \cdot \mathbf{J}_c = 0. \quad (1.160)$$

Mais \mathbf{J}_c n'est que le courant de convection (dû au mouvement des charges). La magnétisation \mathbf{M} est donnée par

$$\mathbf{M} = \frac{e\hbar}{2m_e c}\Psi^*\boldsymbol{\sigma}\Psi = \langle\boldsymbol{\mu}_e\rangle, \quad (1.161)$$

ce qui mène à un courant supplémentaire qu'il faut ajouter dans les équations de Maxwell,

$$\mathbf{J}_s = c\nabla \wedge \mathbf{M} = \frac{e\hbar}{2m_e}\nabla \wedge (\Psi^*\boldsymbol{\sigma}\Psi). \quad (1.162)$$

\mathbf{J}_s représente la composante du courant provenant du spin. Le courant total qui entre dans les équations de Maxwell est donc $\mathbf{J} = \mathbf{J}_c + \mathbf{J}_s$.

Chapitre 2

Théorie des perturbations

La plupart des problèmes de la mécanique quantique n'ont pas de solution analytique; seuls quelques problèmes idéalisés possèdent une solution exacte de l'équation de Schrödinger. Il est dès lors indispensable de développer des méthodes d'approximation. La théorie des perturbations traite des situations dans lesquelles le système physique réel peut être décrit par une petite déviation d'un système idéal (solvable). L'hamiltonien H du système réel est alors de la forme

$$H = H^{(0)} + H^{(P)} , \quad (2.1)$$

où H et $H^{(0)}$ diffèrent peu. $H^{(0)}$ dénote l'hamiltonien du système non-perturbé, tandis que $H^{(P)}$ représente une petite perturbation.

Dans ce chapitre, nous présentons les méthodes perturbatives les plus courantes, illustrées par des applications en physique atomique. L'idée directrice est que le noyau d'un atome est la source du fort potentiel central dans lequel évoluent des électrons; les interactions plus faibles étant décrites par la perturbation. Comme exemples d'interactions, nous citons l'interaction magnétique (couplage spin-orbite), la répulsion électrostatique mutuelle des électrons ou encore l'influence de champs externes, magnétiques ou électriques.

Bien que notre démarche sera formelle, une remarque mathématique de caution doit toutefois être faite : sous des perturbations, même minuscules, le spectre de l'hamiltonien peut changer de manière abrupte! Ceci est surtout vrai pour la partie continue du spectre. Il existe en effet un théorème de Weyl et von Neumann avec l'énoncé suivant :

Soit H un opérateur auto-adjoint. Pour tout $\epsilon > 0$, il existe un opérateur auto-adjoint H' avec norme $\|H'\| < \epsilon$, tel que le spectre de $H + H'$ est purement discret.

Heureusement, la situation est moins dramatique pour des valeurs propres isolées (points isolés du spectre) de multiplicité finie. Pour des perturbations bornées, celles-ci changent même de façon analytique [10, 11].

2.1 Perturbations stationnaires

Pour débiter, nous considérons le cas simplifié où le système idéal d'hamiltonien $H^{(0)}$ subit une perturbation $H^{(P)}$ qui est *constante* dans le temps. On parle alors de perturbation stationnaire.

En premier lieu, nous supposons que l'hamiltonien H associé au système physique réel peut être décomposé suivant Eq. (2.1). De plus, nous supposons que les valeurs propres $E_k^{(0)}$ et états propres $\Psi_k^{(0)}$ de l'hamiltonien non-perturbé sont connus :

$$H^{(0)}\Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)}\Psi_k^{(0)} . \quad (2.2)$$

L'indice k indique que les énergies non-perturbées forment un spectre discret ; nous dénotons par $(\Psi_k^{(0)})$ le système complet d'états propres de $H^{(0)}$ d'énergies $(E_k^{(0)})$.

Lorsque nous demandons que la perturbation $H^{(P)}$ soit petite par rapport à $H^{(0)}$, nous faisons l'hypothèse que la perturbation peut être exprimée en série de puissances d'un paramètre λ

$$H(\lambda) = H^{(0)} + H^{(P)}(\lambda) , \quad (2.3)$$

$$H^{(P)}(\lambda) = \lambda H^{(1)} + \lambda^2 H^{(2)} + \dots , \quad (2.4)$$

où $|\lambda| \ll 1$ est un paramètre réel choisi tel que la perturbation $H^{(P)}(\lambda)$ est petite devant $H^{(0)}$. (A noter que, dans la plupart des applications, $H^{(1)}$ et $H^{(2)}$ sont en effet des opérateurs auto-adjoints non-bornés. Mais, dans notre approche pragmatique, nous ne nous soucions pas de ces problèmes mathématiques. La correspondance avec les résultats expérimentaux va justifier notre démarche. . .) Si λ est suffisamment petit, les valeurs propres et les états propres associés à $H(\lambda)$ ne devraient que peu différer de ceux associés à $H^{(0)}$. Nous avons alors

$$H(\lambda)\Psi_k(\lambda) = E_k(\lambda)\Psi_k(\lambda) , \quad (2.5)$$

et nous supposons que les valeurs propres et fonctions propres peuvent aussi être développées en série de puissance,

$$E_k(\lambda) = E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \lambda^2 E_k^{(2)} + \dots , \quad (2.6)$$

$$\Psi_k(\lambda) = \Psi_k^{(0)} + \lambda \Psi_k^{(1)} + \lambda^2 \Psi_k^{(2)} + \dots . \quad (2.7)$$

Il est avantageux de ne pas normaliser $\Psi_k(\lambda)$, mais plutôt d'imposer la condition

$$\left(\Psi_k(\lambda), \Psi_k^{(0)} \right) = 1 . \quad (2.8)$$

Comme $\Psi_k^{(0)}$ est normalisé, ceci implique

$$\left(\Psi_k^{(n)}, \Psi_k^{(0)} \right) = 0 \quad \forall n > 0 . \quad (2.9)$$

Nous voulons maintenant déterminer les valeurs propres $E_k^{(n)}$ de l'hamiltonien perturbé $H(\lambda)$. En insérant les développements en puissances de λ dans Eq. (2.5), une comparaison des coefficients des puissances successives de λ donne (en sus de Eq. (2.2))

$$\mathcal{O}(\lambda) : \quad H^{(0)}\Psi_k^{(1)} + H^{(1)}\Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)}\Psi_k^{(1)} + E_k^{(1)}\Psi_k^{(0)} , \quad (2.10)$$

$$\mathcal{O}(\lambda^2) : \quad H^{(0)}\Psi_k^{(2)} + H^{(1)}\Psi_k^{(1)} + H^{(2)}\Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)}\Psi_k^{(2)} + E_k^{(1)}\Psi_k^{(1)} + E_k^{(2)}\Psi_k^{(0)} . \quad (2.11)$$

Premier ordre en λ

Le changement d'énergie résultant d'une perturbation $H^{(1)}$ est obtenu en considérant le produit scalaire de Eq. (2.10) avec $\Psi_k^{(0)}$:

$$E_k^{(1)} = \left(\Psi_k^{(0)}, H^{(1)} \Psi_k^{(0)} \right) \quad (2.12)$$

Cette élégante formule est très utile, et sera utilisée dans plusieurs exemples par la suite. Mais, pour l'instant, nous continuons le développement théorique. En prenant le produit scalaire de Eq. (2.10) avec une autre fonction propre de l'hamiltonien non-pertubé, $\Psi_\ell^{(0)}$, $\ell \neq k$, nous obtenons

$$E_\ell^{(0)} \left(\Psi_\ell^{(0)}, \Psi_k^{(1)} \right) + \left(\Psi_\ell^{(0)}, H^{(1)} \Psi_k^{(0)} \right) = E_k^{(0)} \left(\Psi_\ell^{(0)}, \Psi_k^{(1)} \right). \quad (2.13)$$

Un développement de $\Psi_k^{(1)}$ dans la base du système complet d'états propres $(\Psi_\ell^{(0)})$ de $H^{(0)}$ implique

$$\Psi_k^{(1)} = \sum_{\ell \neq k} c_\ell \Psi_\ell^{(0)} \quad \text{avec} \quad c_\ell = \left(\Psi_\ell^{(0)}, \Psi_k^{(1)} \right). \quad (2.14)$$

Pour $\ell \neq k$, ceci mène à une équation pour les coefficients c_ℓ ,

$$\left(\Psi_\ell^{(0)}, H^{(1)} \Psi_k^{(0)} \right) = c_\ell \left(E_k^{(0)} - E_\ell^{(0)} \right). \quad (2.15)$$

Si la valeur propre $E_k^{(0)}$ n'est pas dégénérée, i.e., si $E_\ell^{(0)} \neq E_k^{(0)}$ pour tout $\ell \neq k$, nous obtenons

$$\Psi_k^{(1)} = \sum_{\ell \neq k} \frac{\left(\Psi_\ell^{(0)}, H^{(1)} \Psi_k^{(0)} \right)}{E_k^{(0)} - E_\ell^{(0)}} \Psi_\ell^{(0)} \quad (2.16)$$

La correction du premier ordre au vecteur d'état est donc une superposition linéaire de tous les états non-perturbés autre que $\Psi_k^{(0)}$. La perturbation $H^{(P)}$ entraîne une contamination de l'état $\Psi_k^{(0)}$ par les autres états propres de $H^{(0)}$. On peut aussi remarquer que la condition $|\lambda| \ll 1$ n'est pas suffisante : la correction au premier ordre du vecteur d'état n'est faible que si les éléments de matrice non-diagonaux de $H^{(P)}$ sont petits devant les différences d'énergies non-perturbées correspondantes.

Deuxième ordre en λ

Pour le deuxième ordre, nous considérons le produit scalaire de Eq. (2.11) avec $\Psi_k^{(0)}$:

$$\left(\Psi_k^{(0)}, H^{(1)} \Psi_k^{(1)} \right) + \left(\Psi_k^{(0)}, H^{(2)} \Psi_k^{(0)} \right) = E_k^{(2)}. \quad (2.17)$$

Si le système non-perturbé est non-dégénéré, nous pouvons introduire l'expression (2.16) pour $\Psi_k^{(1)}$, ce qui donne

$$E_k^{(2)} = \left(\Psi_k^{(0)}, H^{(2)} \Psi_k^{(0)} \right) + \sum_{\ell \neq k} \frac{\left| \left(\Psi_\ell^{(0)}, H^{(1)} \Psi_k^{(0)} \right) \right|^2}{E_k^{(0)} - E_\ell^{(0)}} \quad (2.18)$$

où nous avons utilisé que

$$\left| \left(\Psi_\ell^{(0)}, H^{(1)} \Psi_k^{(0)} \right) \right|^2 = \left(\Psi_k^{(0)}, H^{(1)} \Psi_\ell^{(0)} \right) \left(\Psi_\ell^{(0)}, H^{(1)} \Psi_k^{(0)} \right). \quad (2.19)$$

La somme infinie de Eq. (2.18) se simplifie si nous trouvons un opérateur F_k tel que

$$H^{(1)} \Psi_k^{(0)} = \left[F_k, H^{(0)} \right] \Psi_k^{(0)}. \quad (2.20)$$

En effet, l'introduction de cet opérateur permet d'écrire

$$\begin{aligned} \left(\Psi_\ell^{(0)}, H^{(1)} \Psi_k^{(0)} \right) &= \left(\Psi_\ell^{(0)}, \left[F_k, H^{(0)} \right] \Psi_k^{(0)} \right) \\ &= \left(E_k^{(0)} - E_\ell^{(0)} \right) \left(\Psi_\ell^{(0)}, F_k \Psi_k^{(0)} \right). \end{aligned} \quad (2.21)$$

En insérant ce dernier résultat dans Eq. (2.18), on trouve, pour le cas $H^{(2)} = 0$,

$$\begin{aligned} E_k^{(2)} &= \sum_{\ell \neq k} \left(\Psi_k^{(0)}, H^{(1)} \Psi_\ell^{(0)} \right) \left(\Psi_\ell^{(0)}, F_k \Psi_k^{(0)} \right) \\ &= \sum_{\ell} \left(\Psi_k^{(0)}, H^{(1)} \Psi_\ell^{(0)} \right) \left(\Psi_\ell^{(0)}, F_k \Psi_k^{(0)} \right) \\ &\quad - \left(\Psi_k^{(0)}, H^{(1)} \Psi_k^{(0)} \right) \left(\Psi_k^{(0)}, F_k \Psi_k^{(0)} \right) \\ &= \left(\Psi_k^{(0)}, H^{(1)} F_k \Psi_k^{(0)} \right) - E_k^{(1)} \left(\Psi_k^{(0)}, F_k \Psi_k^{(0)} \right). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Pour la dernière égalité, nous avons utilisé que les $\Psi_\ell^{(0)}$ forment une base orthonormée complète. La dernière expression ne contient pas de somme et elle est souvent plus pratique.

Remarques :

- Les résultats (2.12) et (2.17) sont génériques, tandis que (2.16) et (2.18) ne sont applicables que pour des systèmes non-dégénérés (valable pour l'oscillateur harmonique, mais non pour l'atome d'hydrogène).
- De Eq. (2.16), on conclut que les niveaux voisins à $E_k^{(0)}$ contribuent plus à $\Psi_k^{(1)}$ que les niveaux éloignés. C'est aussi vrai pour $E_k^{(2)}$ d'après Eq. (2.18).
- Supposons que k dénote l'état fondamental du système, $E_k^{(0)} < E_\ell^{(0)} \forall \ell$. Alors, si $H^{(2)} \equiv 0$, $E_k^{(2)}$ est *negative* pour l'état fondamental.
- Si le niveau $E_\ell^{(0)}$ est important (i.e., $E_\ell^{(0)}$ proche de $E_k^{(0)}$ et l'élément de matrice $(\Psi_\ell^{(0)}, H^{(1)} \Psi_k^{(0)})$ considérable) et si $E_\ell^{(0)} > E_k^{(0)}$, alors E_k est réduit et E_ℓ est augmenté au deuxième ordre : c'est le phénomène de répulsion des niveaux.
- Si la valeur propre $E_k^{(0)}$ est non-dégénérée, les résultats (2.16) et (2.18) sont valables même si les $E_\ell^{(0)}$ sont dégénérées pour $\ell \neq k$.
- Si, mise à part $E_k^{(0)}$, le spectre de $H^{(0)}$ contient aussi une partie continue, on peut écrire

$$E_k^{(2)} = \left(\Psi_k^{(0)}, H^{(2)} \Psi_k^{(0)} \right) + \int_{\epsilon \neq E_k^{(0)}} \frac{\left(\Psi_\ell^{(0)}, H^{(1)} P^{(0)}(d\epsilon) \Psi_k^{(0)} \right)}{E_k^{(0)} - \epsilon}, \quad (2.23)$$

où $P^{(0)}(d\epsilon)$ est la mesure spectrale de $H^{(0)}$ (pour la définition de $P^{(0)}$ et la preuve du théorème spectral, voir [8], chapitre VIII).

Perturbation d'un niveau dégénéré

Nous traitons maintenant le cas où $E_k^{(0)}$ est dégénéré. Soit $P_k^{(0)}$ le projecteur sur l'espace propre de $E_k^{(0)}$. Pour $\varphi \in P_k^{(0)}\mathcal{H}$, on a $(\varphi, [H^{(0)} - E_k^{(0)}]\Psi_k^{(1)}) = 0$; en d'autres termes, $[H^{(0)} - E_k^{(0)}]\Psi_k^{(1)}$ est orthogonal à $P_k^{(0)}\mathcal{H}$. L'équation (2.10) implique alors

$$\left(\varphi, [H^{(1)} - E_k^{(1)}]\Psi_k^{(0)}\right) = 0, \quad \forall \varphi \in P_k^{(0)}\mathcal{H}, \quad (2.24)$$

ou encore

$$\left(P_k^{(0)}H^{(1)}P_k^{(0)} - E_k^{(1)}\right)\Psi_k^{(0)} = 0. \quad (2.25)$$

Alors, $E_k^{(1)}$ est valeur propre de $P_k^{(0)}H^{(1)}P_k^{(0)}$. Ceci réduit le problème à la diagonalisation (décomposition spectrale) de $P_k^{(0)}H^{(1)}P_k^{(0)}$, qui est en général une matrice hermitienne de dimension finie,

$$P_k^{(0)}H^{(1)}P_k^{(0)} = \sum_{\alpha=1}^N E_{\alpha}^{(1)}Q_{\alpha}, \quad (2.26)$$

où $N = \dim(P_k^{(0)}\mathcal{H})$ et $Q_{\alpha} = P_{\varphi_{\alpha}}$ sont les projecteurs orthogonaux sur une base $(\varphi_{\alpha})_{\alpha=1}^N$ orthonormée de vecteurs propres de $P_k^{(0)}H^{(1)}P_k^{(0)}$ sur $P_k^{(0)}\mathcal{H}$.

Très souvent, la dégénérescence est due à une symétrie du problème. $P_k^{(0)}\mathcal{H}$ porte alors une représentation irréductible d'un groupe de symétrie G de l'hamiltonien non-perturbé. L'hamiltonien perturbé n'est normalement symétrique que sous un sous-groupe $G' \subset G$ et la dégénérescence est partiellement levée par la perturbation. Dans ce cas, la décomposition (2.26) peut être effectuée à l'aide de la théorie des groupes. Nous verrons ceci dans les applications.

2.2 Applications

Le but de cette section est d'illustrer de manière concrète la théorie des perturbations stationnaires. Pour cela, nous allons considérer soit l'atome d'hydrogène, soit l'atome d'hélium, avec hamiltonien générique

$$H = H^{(0)} + H^{(P)}, \quad (2.27)$$

où

$$H^{(0)} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) \quad (2.28)$$

est la somme des énergies cinétiques et des potentiels électrostatiques des différents électrons.

L'intérêt pour l'atome d'hélium est qu'il illustre de façon relativement simple une grande partie des propriétés des atomes à plusieurs électrons.

Pour la petite perturbation $H^{(P)}$ de l'hamiltonien idéalisé $H^{(0)}$, nous allons considérer différentes sources. D'une part, nous traiterons comme perturbation la répulsion mutuelle des électrons de l'atome d'hélium, et l'influence d'un champ extérieur statique électrique (effet Stark) ou magnétique (effet Zeemann); il en résulte alors un déplacement global des niveaux atomiques. D'autre part, nous

allons également traiter comme perturbation l'interaction du spin de l'électron en orbite avec le champ électrostatique du noyau (couplage spin-orbite), et l'interaction du spin du noyau avec les couches électroniques (interaction spin-spin) ; il en résulte une séparation des niveaux atomiques, i.e., une levée partielle de la dégénérescence des lignes spectrales.

2.2.1 Atome d'hélium : état fondamental

Comme premier exemple, nous allons utiliser la méthode des perturbations pour évaluer l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hélium ou, plus généralement, celle d'un atome $(Z-2)$ fois ionisés. La masse du noyau étant nettement supérieure à celles des électrons qui l'orbitent, ceci nous permet de considérer le noyau comme fixe. Ainsi, l'hamiltonien des Z électrons peut être écrit sous la forme

$$H = \sum_{i=1}^Z \underbrace{\left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i} \right)}_{H^{(0i)}} + \sum_{i<j}^Z \underbrace{\frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}}_{V_{ij}}, \quad (2.29)$$

où nous avons supposé que le noyau se trouve en $\mathbf{x} = 0$. Cet hamiltonien comprend essentiellement trois termes : le premier représente l'énergie cinétique totale du système des Z électrons, le deuxième l'attraction exercée sur chacun d'eux par le noyau (qui porte une charge positive égale à $-Ze$, avec $Z = 2$ pour l'hélium), et le dernier la répulsion mutuelle des électrons.

En l'absence du terme d'interaction mutuelle, $V_{ij} = 0$, les électrons sont indépendants. Il est alors facile de déterminer les énergies de l'atome : il suffit d'effectuer la somme des énergies des Z électrons placés individuellement dans le potentiel coulombien. Les états propres de l'atome sont ensuite obtenus en antisymétrisant le produit tensoriel des états stationnaires des divers électrons. C'est la présence du terme d'interaction mutuelle qui empêche une solution exacte du problème ; un traitement perturbatif est alors nécessaire.

Pour l'instant, nous nous focalisons sur l'état fondamental de l'hélium en négligeant l'interaction des électrons, i.e., nous posons $H^{(P)} = V_{12} = 0$ et $H^{(0)} = H^{(01)} + H^{(02)}$, où $H^{(0i)}$ est l'hamiltonien d'un atome d'hydrogène. Comme $[H^{(01)}, H^{(02)}] = 0$, nous pouvons diagonaliser simultanément les $H^{(0i)}$. Soit $\Psi_k^{(0i)}(\mathbf{x}_i)$ un état propre de $H^{(0i)}$ d'énergie $E_k^{(0i)}$, alors $\Psi_k^{(01)}(\mathbf{x}_1) \cdot \Psi_\ell^{(02)}(\mathbf{x}_2)$ est un état propre de $H^{(0)}$ d'énergie $E_k^{(01)} + E_\ell^{(02)}$. L'énergie de l'état fondamental est donc celle d'un atome d'hydrogène avec charge du noyau $-eZ$.

$$E_0^{(0)} = -2 \cdot \frac{1}{2} \frac{Z^2 e^2}{a_0} = -2Z^2 (13.6\text{eV}) = -2Z^2 \text{ Rydberg}, \quad (2.30)$$

où a_0 est le rayon de Bohr¹. En posant $a = a_0/Z$, la fonction d'onde de cet état fondamental de $H^{(0)}$ est donnée par (voir appendice A.3.1)

$$\Psi_0^{(0)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \Psi_0^{(01)}(\mathbf{x}_1) \cdot \Psi_0^{(02)}(\mathbf{x}_2) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-(r_1+r_2)/a}. \quad (2.31)$$

¹Le rayon de Bohr est $a_0 = \frac{\lambda_c}{2\pi\alpha} = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529\text{\AA}$, où $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$ est la constante adimensionnelle de structure fine et $\lambda_c = \frac{2\pi\hbar}{m_e c}$ est la longueur d'onde de Compton de l'électron.

D'après Eq. (2.12), la correction à l'énergie de l'état fondamental due à la répulsion électronique est donnée, au premier ordre, par

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= \left(\Psi_0^{(0)}, V \Psi_0^{(0)} \right) = \int \Psi_0^{(0)*} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \Psi_0^{(0)} d^3x_1 d^3x_2 \\ &= \frac{e^2}{\pi^2 a^6} \int \frac{e^{-2(r_1+r_2)/a}}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} d^3x_1 d^3x_2 . \end{aligned} \quad (2.32)$$

Comme en électrostatique, nous avons l'identité (exercice)

$$\frac{1}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>}^{\ell+1}} \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \bar{Y}_{\ell,m}(\hat{\mathbf{x}}_1) Y_{\ell,m}(\hat{\mathbf{x}}_2) , \quad (2.33)$$

où $r_{<} = \text{Min}(r_1, r_2)$ et $r_{>} = \text{Max}(r_1, r_2)$. Ceci nous permet d'écrire

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= 16\pi^2 \int_0^{\infty} \rho(r_1) r_1 dr_1 \left[\int_0^{r_1} \rho(r_2) r_2^2 dr_2 + r_1 \int_{r_1}^{\infty} \rho(r_2) r_2 dr_2 \right] \\ &= \frac{5e^2}{8a} = \frac{5}{8} \frac{Z e^2}{a_0} , \end{aligned} \quad (2.34)$$

où l'on a utilisé

$$\rho(r) = -\frac{e}{\pi a^3} e^{-2r/a} , \quad (2.35)$$

$$\int_{\mathbb{S}^2} Y_{\ell,m}(\mathbf{n}) d\Omega = \sqrt{4\pi} \delta_{\ell,0} \delta_{m,0} = \int_{\mathbb{S}^2} \bar{Y}_{\ell,m}(\mathbf{n}) d\Omega . \quad (2.36)$$

Ainsi, la prise en compte de la répulsion mutuelle des électrons implique que l'énergie du niveau fondamental est donnée par

$$E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + \dots \simeq -\frac{Z^2 e^2}{a_0} \left(1 - \frac{5}{8} \frac{1}{Z} \right) . \quad (2.37)$$

La répulsion mutuelle des électrons relève donc l'énergie du niveau fondamental. D'autre part, comme on pouvait déjà le déduire de l'hamiltonien, la correction est plus petite pour des valeurs élevées de Z . Une comparaison entre quelques résultats théoriques et expérimentaux est donnée dans la Table 2.1.

Atome	Z	$E_0^{(0)th}$ [eV]	E_0^{th} [eV]	E_0^{exp} [eV]	erreur
<i>He</i>	2	-109	-75	-79	< 6%
<i>Li</i> ⁺	3	-245	-194	-197	< 2%
<i>Be</i> ⁺⁺	4	-436	-368	-370	< 1%

TAB. 2.1 – Comparaison entre valeurs théoriques (*th*) et valeurs expérimentales (*exp*) de l'énergie associée à l'état fondamental E_0 pour divers ions. L'approximation est d'autant meilleure (en valeur relative) que l'énergie de répulsion mutuelle des électrons est petite par rapport à l'énergie d'attraction du noyau. Elle est donc d'autant meilleure que Z est élevé.

2.2.2 Atome d'hydrogène : effet Stark

Comme deuxième exemple de la théorie des perturbations, nous déterminons l'influence d'un champ électrique homogène sur un atome d'hydrogène. Il en résulte un abaissement du niveau atomique fondamental qui est quadratique dans le champ électrique. Ce phénomène a été mis en évidence expérimentalement par Stark en 1913.

Nous considérons un atome d'hydrogène dans un champ électrique statique, uniforme et parallèle à \mathbf{e}_z , $\mathbf{E} = \xi \mathbf{e}_z$. Nous allons supposer que l'intensité de ce champ électrique est suffisamment faible pour que l'énergie additionnelle induite est petite comparée aux distances entre les niveaux d'énergie non-perturbés de l'atome. La théorie des perturbations peut alors être utilisée pour calculer le déplacement des niveaux d'énergie.

La perturbation Stark est donnée par $H^{(P)} = V_S = q\mathbf{x} \cdot \mathbf{E} = e\xi z$. Ainsi, V_S n'est rien d'autre que l'énergie potentielle de l'électron dans un champ électrique externe. L'hamiltonien du système s'écrit alors

$$H = H^{(0)} + V_S = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} + e\xi z . \quad (2.38)$$

Comme avant, l'état fondamental non-perturbé est l'état fondamental de l'atome d'hydrogène,

$$\Psi_0^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} , \quad a = a_0/Z . \quad (2.39)$$

Comme la parité du niveau fondamental est bien définie, ($\Psi_0^{(0)}$ est pair), et que $V_S = e\xi z$ est impair sous une réflexion de l'espace, $z \mapsto -z$, on a

$$E_0^{(1)} = \left(\Psi_0^{(0)}, V_S \Psi_0^{(0)} \right) = e\xi \int d^3x z \left| \Psi_0^{(0)} \right|^2 = 0 . \quad (2.40)$$

Il n'y a donc pas d'effet linéaire dans le champ électrique \mathbf{E} , et nous devons calculer le second terme de la série de perturbation, $E_0^{(2)}$. Pour ceci, nous utilisons Eq. (2.20) pour l'opérateur F_0 ,

$$V_S \Psi_0^{(0)} = \left[F_0, H^{(0)} \right] \Psi_0^{(0)} \implies e\xi z e^{-r/a} = \left[F_0, H^{(0)} \right] e^{-r/a} . \quad (2.41)$$

Nous faisons un Ansatz pour F_0 comme une simple fonction de la forme

$$F_0 = z f(r) = r \cos(\vartheta) f(r) . \quad (2.42)$$

Avec $\mathbf{p}^2 = -\hbar^2 \Delta$, nous obtenons ²

$$\begin{aligned} [F_0, \Delta] e^{-r/a} &= F_0 \Delta e^{-r/a} - \Delta (F_0 e^{-r/a}) \\ &= -(\Delta F_0) e^{-r/a} - 2(\nabla F_0) \cdot (\nabla e^{-r/a}) \\ &= -\cos(\vartheta) \left[r f'' - \frac{2}{a} (r - 2a) f' - \frac{2}{a} f \right] e^{-r/a} . \end{aligned} \quad (2.43)$$

²En coordonnées polaires et pour une fonction $F(r, \vartheta, \varphi)$ quelconque, nous avons :

$$\begin{aligned} \nabla F &= \left(\partial_r F, \frac{1}{r} \partial_\vartheta F, \frac{1}{r \sin(\vartheta)} \partial_\varphi F \right) , \\ \Delta F &= \frac{1}{r} \partial_r^2 (rF) + \frac{1}{r^2 \sin(\vartheta)} \partial_\vartheta [\sin(\vartheta) \partial_\vartheta F] + \frac{1}{r^2 \sin^2(\vartheta)} \partial_\varphi^2 F . \end{aligned}$$

En insérant cette expression dans Eq. (2.41), nous trouvons

$$r f'' - \frac{2}{a} (r - 2a) f' - \frac{2}{a} f = 2 \frac{e\xi m_e}{\hbar^2} r = 2\beta r, \quad (2.44)$$

où $\beta := e\xi m_e \hbar^{-2}$. Comme on peut le vérifier par inspection, une intégrale particulière est

$$f(r) = -\frac{1}{2} a \beta (r + 2a). \quad (2.45)$$

D'après Eq. (2.22), le second terme de la série de perturbation est

$$\begin{aligned} E_0^{(2)} &= \left(\Psi_0^{(0)}, H^{(1)} F_0 \Psi_0^{(0)} \right) - E_0^{(1)} \left(\Psi_0^{(0)}, F_0 \Psi_0^{(0)} \right) \\ &= -\frac{1}{\pi a^3} \int e^{-2r/a} \frac{\beta^2 \hbar^2}{2m_e} a z^2 (r + 2a) r^2 dr \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Pour évaluer cette dernière intégrale, on utilise

$$\sin(\vartheta) d\vartheta = -d\mu \quad \rightarrow \quad \mu = \cos(\vartheta) \quad \rightarrow \quad z^2 = r^2 \mu^2, \quad (2.47)$$

$$\int_{\mathbb{S}^2} z^2 \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi = 2\pi r^2 \int_{-1}^1 \mu^2 d\mu = \frac{4\pi}{3} r^2, \quad (2.48)$$

ce qui nous permet d'obtenir

$$E_0^{(2)} = -\frac{4}{3} \frac{\beta^2 \hbar^2}{m_e a^2} \int_0^\infty e^{-2r/a} \left(\frac{r}{2} + a \right) r^4 dr = -\frac{9}{4} \frac{\beta^2 \hbar^2}{m_e} a^4 = -\frac{9}{4} a^3 \xi^2. \quad (2.49)$$

où, pour la dernière égalité, nous avons utilisé $\beta = e\xi m_e \hbar^{-2}$ et $a = \hbar^2 / (m_e e^2)$. On peut en conclure que, à l'ordre le plus bas en ξ , le déplacement Stark du niveau fondamental ($n = 1$) de l'atome d'hydrogène est quadratique en ξ . De plus, cet effet porte un signe négatif, i.e., le niveau fondamental est abaissé.

On peut aussi s'intéresser à l'effet Stark sur le premier état excité de l'atome d'hydrogène. Il s'avère que la dégénérescence du niveau $n = 2$ est partiellement levée et que les déplacements énergétiques sont *linéaires* et non plus quadratiques en ξ . L'apparition d'un effet Stark linéaire est typique de l'existence de deux états de parité opposée et de même énergie. Cette situation n'existe *que* dans le cas de l'hydrogène (cf. série de Balmer).

Ici nous avons traité le champ électrique comme une petite perturbation. Mais, pour z grand, le terme $e\xi z$ sera la composante *dominante* de l'hamiltonien ; pour $z \rightarrow \infty$, l'énergie potentielle tend vers moins infini. Ceci implique que l'hamiltonien $H = H^{(0)} + V_S$ n'a pas d'état lié, mais un spectre continu.

Notre calcul a quand même un certain sens, car une barrière d'énergie reste présente et, pour des champs électriques faibles, la probabilité que l'électron s'échappe par effet tunnel est faible. Si on néglige ce processus, l'électron est piégé dans un intervalle fini $[z_1, z_2]$ où la contribution du champ électrique à l'énergie est petite (cf. Fig. 2.1).

2.2.3 Atome d'hydrogène : couplage spin-orbite et effet Zeemann

Ayant considéré les propriétés quantiques d'un atome d'hydrogène dans le vide ou sous l'influence d'un champ électrique, nous allons maintenant décrire

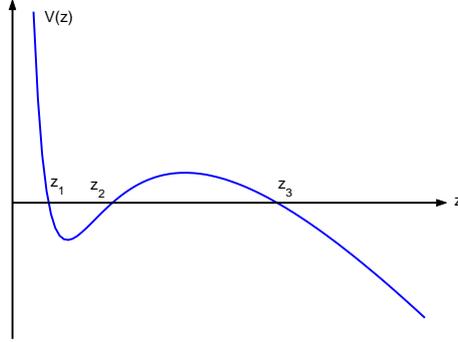


FIG. 2.1 – Nous illustrons ici le potentiel $V(z) = \frac{L^2}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{r} + e\xi z$ pour x, y fixés. Un électron piégé dans la région $[z_1, z_2]$ a une petite probabilité non-nulle de s'échapper par effet tunnel dans la région $z > z_3$, où il sera non-lié. En négligeant ce processus, notre approximation fait du sens ($z_1 = 0$ pour $\mathbf{L} = 0$).

les nouveaux effets induits par le couplage spin-orbite (qui fait partie de la structure fine) ou qui apparaissent lorsque cet atome est plongé dans un champ magnétique, statique et uniforme (effet Zeemann). Dans ce cas, nous supposons que les effets de ce champ magnétique extérieur sont faibles devant ceux dus au champ électrique interne de l'atome (ainsi, les déplacements des niveaux atomiques dus au champ magnétique restent petits par rapport aux écarts énergétiques en champ nul). De manière générale, l'effet Zeemann regroupe les modifications du spectre optique émis par des atomes lorsqu'ils sont plongés dans un champ magnétique statique.

Nous considérons donc l'atome d'hydrogène. Dans un champ magnétique constant, la partie orbitale de l'hamiltonien est

$$H_o = \frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(r) , \quad (2.50)$$

où le potentiel central $V(r) = -e^2/r$ représente l'énergie d'interaction électrostatique entre l'électron et le proton, et \mathbf{A} est le potentiel vecteur. Pour obtenir l'équation de Pauli, Eq. (1.157), nous avons supposé que la partie provenant du spin, Eq. (1.155), prend la forme

$$H_s = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} = -g \frac{e}{2m_e c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} , \quad (2.51)$$

où \mathbf{B} est le champ magnétique externe et $g = 2$ pour un électron. Mais, pour être consistant, il faut prendre en compte que l'électron se déplace à la vitesse $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m_e$ (à l'ordre le plus bas en v/c) dans le champ électrostatique \mathbf{E} créé par le proton. La relativité restreinte implique qu'il apparaît alors, dans le référentiel propre de l'électron, un champ magnétique $\tilde{\mathbf{B}}$ donné (au premier ordre en v/c) par $\tilde{\mathbf{B}} = -(\mathbf{v} \wedge \mathbf{E})/c$. Comme l'électron possède un moment magnétique intrinsèque $\boldsymbol{\mu}_s = \frac{e}{m_e c} \mathbf{S}$, il interagit avec ce champ $\tilde{\mathbf{B}}$; l'énergie d'interaction correspondante, $H_{so} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \tilde{\mathbf{B}}$, représente donc un couplage entre le mouvement orbital et le spin. Le champ électrostatique créé par le proton est donné

par $\mathbf{E} = -\frac{1}{e} \frac{dV}{dr} \frac{\mathbf{x}}{r}$. Ainsi, on obtient

$$\tilde{\mathbf{B}} = \frac{1}{c} \frac{1}{er} \frac{dV}{dr} \left(\frac{\mathbf{p}}{m_e} \wedge \mathbf{x} \right) = -\frac{1}{m_e c} \frac{1}{er} \frac{dV}{dr} \mathbf{L}, \quad (2.52)$$

ce qui implique un couplage spin-orbite

$$“H_{so}” = \frac{1}{m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \quad (2.53)$$

Ce terme a été proposé par Goudsmit et Uhlenbeck (1925). Malheureusement, il est trop grand d'un facteur 2. Comme nous le verrons dans la théorie de Dirac, les corrections relativistes réduisent ce terme d'un facteur 2, tel que le bon couplage entre spin et orbite est

$$H_{so} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}. \quad (2.54)$$

Physiquement, ce terme représente l'interaction du moment magnétique du spin de l'électron avec le champ magnétique “vu” par l'électron du fait de son mouvement dans le champ électrostatique du proton.

Lorsque l'on tient compte du spin de l'électron ainsi que de son mouvement orbital autour du proton, l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène est, en présence d'un champ magnétique, donné par ($g = 2$)

$$\begin{aligned} H &= H_o + H_s + H_{so} \\ &= \frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(r) - \frac{e}{m_e c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} + \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Comme dans le chap. 1 nous négligeons la dépendance spatiale de \mathbf{B} et l'approximons comme champ constant (ce qui est une très bonne approximation pour des champ macroscopique sur l'échelle atomique). Nous pouvons alors poser $\mathbf{A} = \frac{1}{2} (\mathbf{B} \wedge \mathbf{x})$, le potentiel vectoriel dans la jauge de Coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$.

Nous obtenons alors (cf. Eqs. (1.150)–(1.151))

$$\frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{e}{2m_e c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} + \frac{e^2}{2m_e c^2} \mathbf{A}^2. \quad (2.56)$$

Si le champ magnétique est suffisamment faible, on peut encore négliger le terme “diamagnétique” en \mathbf{B}^2 . L'hamiltonien de notre système se réduit alors à

$$H \simeq \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V(r) - \frac{e}{2m_e c} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) + \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}. \quad (2.57)$$

Pour distinguer les effets dûs au champ magnétique de ceux relatifs à la prise en compte du spin de l'électron et de son mouvement orbital, nous considérons tout d'abord l'atome d'hydrogène sans champ extérieur.

Cas $\mathbf{B} = 0$: couplage spin-orbite, structure fine

Le couplage spin-orbite est à l'origine d'une séparation des niveaux d'énergie atomiques. C'est ce que l'on se propose de déterminer pour des atomes alkali.

Dans le cas $\mathbf{B} = 0$, la perturbation de l'hamiltonien dépend uniquement du couplage spin-orbite, i.e.,

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V(r) + \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} . \quad (2.58)$$

Cet hamiltonien ne commute qu'avec le moment cinétique total, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, i.e., chaque niveau de H correspond à une valeur donnée J du moment cinétique total. A cause du terme $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$, le groupe de symétrie $SU(2)_{\text{orbital}} \otimes SU(2)_{\text{spin}}$ se réduit à un $SU(2)_{\text{diagonal}}$.

Puisque $\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, on a $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2)$. D'autre part, comme H , \mathbf{J}^2 , \mathbf{L}^2 et \mathbf{S}^2 commutent entre eux, les états propres de l'électron dans le potentiel du noyau ont des valeurs³ n , j , ℓ et s fixés. Nous dénotons un tel état propre par

$$|n, j, \ell, s\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow n, j, \ell, s}(\mathbf{x}) \\ \Psi_{\downarrow n, j, \ell, s}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} , \quad (2.59)$$

où $s = \frac{1}{2}$ pour l'électron. L'hamiltonien pour l'état $|n, j, \ell, \frac{1}{2}\rangle$ est ainsi

$$H |n, j, \ell, \frac{1}{2}\rangle = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V_{\text{eff}}(r) \right] |n, j, \ell, \frac{1}{2}\rangle , \quad (2.60)$$

où l'on a introduit le potentiel effectif

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right] . \quad (2.61)$$

Dans cette expression, nous avons utilisé que $s = \frac{1}{2}$. Nous avons donc $j = \ell \pm \frac{1}{2}$, sauf pour les états s (i.e., $\ell = 0$) pour lesquels $j = s = \frac{1}{2}$ (cf. Annexe A.1 pour la notation spectroscopique). Pour des valeurs de n et ℓ fixées, le potentiel effectif est une fonction de j , ce qui implique que la correction en énergie due au terme de couplage spin-orbite dépend du moment angulaire total, J . Les niveaux d'énergie pour un couple (n, ℓ) donné se divisent en deux si $\ell \neq 0$, et on obtient des doublets : cette séparation est appelée la *structure fine* des niveaux atomiques.

	$\ell = 0$	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$	$\ell = 4$	\dots
$j = \ell - \frac{1}{2}$		$p_{\frac{1}{2}}$	$d_{\frac{3}{2}}$	$f_{\frac{5}{2}}$	$g_{\frac{7}{2}}$	\dots
$j = \ell + \frac{1}{2}$	$s_{\frac{1}{2}}$	$p_{\frac{3}{2}}$	$d_{\frac{5}{2}}$	$f_{\frac{7}{2}}$	$g_{\frac{9}{2}}$	\dots

TAB. 2.2 – Niveaux de structure fine de l'atome d'hydrogène (voir aussi figure 2.3). Le niveau s ($\ell = 0$) de l'atome d'hydrogène ne possède pas de structure fine. Par contre, le niveau p ($\ell = 1$) se scinde en $p_{\frac{3}{2}}$ pour $j = \frac{3}{2}$ et $p_{\frac{1}{2}}$ pour $j = \frac{1}{2}$ sous l'effet du couplage spin-orbite. A noter que l'atome d'hydrogène peut passer de l'état p à l'état s en émettant un photon Lyman α ($\lambda = 1216\text{\AA}$). La raie Lyman α comporte en fait deux raies voisines, $p_{\frac{3}{2}} \rightarrow s_{\frac{1}{2}}$ et $p_{\frac{1}{2}} \rightarrow s_{\frac{1}{2}}$, séparées par un intervalle énergétique de $\frac{1}{32} m_e c^2 \alpha^4$ (voir exercices).

³Nous indiquons par n est le nombre quantique principal, ℓ la valeur du moment cinétique orbital, et $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ le moment cinétique total.

Nous voulons encore déterminer la différence d'énergie d'un doublet. On a

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_{n,\ell,j=\ell+\frac{1}{2}} - E_{n,\ell,j=\ell-\frac{1}{2}}, \\ &= \frac{\hbar^2}{4m_e^2c^2} \langle n,\ell | \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} | n,\ell \rangle [(\ell + \frac{1}{2})(\ell + \frac{3}{2}) - (\ell - \frac{1}{2})(\ell + \frac{1}{2})] \\ &= \frac{\hbar^2}{4m_e^2c^2} \langle n,\ell | \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} | n,\ell \rangle (2\ell + 1) \quad \text{pour } \ell \geq 1, n > \ell. \quad (2.62)\end{aligned}$$

Ici $|n,\ell\rangle$ est un des états $|n,\ell,m\rangle$ de l'hamiltonien non-perturbé (sans le terme $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$).

Cette interaction est responsable, par exemple, des lignes *d* du sodium qui sont très bien connues en spectroscopie. Le doublet est produit par les transitions $p_{\frac{3}{2}} \rightarrow s_{\frac{1}{2}}$ et $p_{\frac{1}{2}} \rightarrow s_{\frac{1}{2}}$. La variation d'énergie ΔE du sodium est plus grande que pour l'hydrogène car le potentiel $V(r)$ varie plus rapidement surtout pour des petits r , si l'électron de valence pénètre à travers les couches intérieures remplies.

Cas $\mathbf{B} \neq 0$: effet Zeemann faible

Nous considérons maintenant l'influence d'un champ magnétique non nul et constant. Nous allons supposer que ce champ est suffisamment faible de manière à ce que $\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}$ soit petit comparé aux distances entre les niveaux d'énergie de la structure fine de l'atome. D'après Eq. (2.57), l'hamiltonien est

$$H \simeq \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V(r) - \frac{e}{2m_e c} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{J} + \mathbf{S}) + f(r) \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \quad (2.63)$$

avec $f(r) = \frac{1}{2m_e^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}$. Nous introduisons la fréquence de Larmor, $\omega = -\frac{eB}{2m_e c}$. En choisissant nos axes tels que \mathbf{B} soit dans la direction \mathbf{e}_z , le troisième terme de l'hamiltonien (2.63) se réduit à $\omega(J_z + S_z)$. En l'absence de ce terme, nous venons de voir que les états propres de l'hamiltonien peuvent être dénotés par $|n,\ell \pm \frac{1}{2}, m, \ell\rangle$, où m est la composante de \mathbf{J} suivant la direction z , i.e., $J_z |n,\ell \pm \frac{1}{2}, m, \ell\rangle = \hbar m |n,\ell \pm \frac{1}{2}, m, \ell\rangle$.

Le changement d'énergie induit par le terme "magnétique" est alors

$$\begin{aligned}\Delta E &= \omega \langle n,\ell \pm \frac{1}{2}, m, \ell | J_z + S_z | n,\ell \pm \frac{1}{2}, m, \ell \rangle \\ &= \hbar \omega m + \omega \langle S_z \rangle. \quad (2.64)\end{aligned}$$

Pour déterminer la contribution de $\omega \langle S_z \rangle$, on pourrait faire le développement

$$|n,\ell \pm \frac{1}{2}, m, \ell\rangle = \sum_{m_\ell, m_s} c_{m_\ell, m_s, m, \ell} |n,\ell, m_\ell, m_s\rangle, \quad (2.65)$$

$$c_{m_\ell, m_s, m, \ell} = \langle \ell, \frac{1}{2}, m_\ell, m_s | \ell \pm \frac{1}{2}, m, \ell \rangle, \quad (2.66)$$

ce qui revient à calculer les coefficients de Clebsch-Gordan, $c_{m_\ell, m_s, m, \ell}$. Ici, nous préférons déterminer directement les états $|n,\ell \pm \frac{1}{2}, m, \ell\rangle$. Dans ce but, nous considérons un état $|n, j, m, \ell\rangle$ général et écrivons $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ sous forme matricielle :

$$|n, j, m, \ell\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad (2.67)$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} \mathbb{I}_2 + \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}, \quad \text{donc} \quad J_z = \begin{pmatrix} L_z + \frac{1}{2} \hbar & 0 \\ 0 & L_z - \frac{1}{2} \hbar \end{pmatrix}. \quad (2.68)$$

Ainsi, $J_z |n, j, m, \ell\rangle = \hbar m |n, j, m, \ell\rangle$ donne les deux équations

$$(L_z + \frac{1}{2}\hbar) \Psi_1 = \hbar m \Psi_1 \quad \text{et} \quad (L_z - \frac{1}{2}\hbar) \Psi_2 = \hbar m \Psi_2, \quad (2.69)$$

ce qui implique

$$\Psi_1 = a_1 R_{n,\ell}(r) Y_{\ell, m - \frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi), \quad (2.70)$$

$$\Psi_2 = a_2 R_{n,\ell}(r) Y_{\ell, m + \frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi). \quad (2.71)$$

Pour déterminer les préfacteurs a_1 et a_2 , nous utilisons que $|n, j, m, \ell\rangle$ est aussi une fonction propre de \mathbf{J}^2 avec valeur propre $\hbar^2 j(j+1)$. Or, sous forme matricielle, nous avons

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 &= (\mathbf{L} \mathbb{1}_2 + \frac{1}{2}\hbar \boldsymbol{\sigma})^2 = \mathbf{L}^2 \mathbb{1}_2 + \hbar \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{3}{4}\hbar^2 \mathbb{1}_2 \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z & \hbar L_- \\ \hbar L_+ & \mathbf{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.72)$$

où $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$. D'après Eq. (1.66), nous avons

$$L_{\pm} Y_{\ell, m} = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} Y_{\ell, m \pm 1}. \quad (2.73)$$

En combinant $\mathbf{J}^2 |n, j, m, \ell\rangle = \hbar^2 j(j+1) |n, j, m, \ell\rangle$ avec les expressions (2.72)–(2.73) et (2.69), nous obtenons le système d'équations

$$\begin{aligned} a_1 [\ell(\ell+1) + \frac{3}{4} + (m - \frac{1}{2}) - j(j+1)] \\ + a_2 \sqrt{\ell(\ell+1) - (m + \frac{1}{2})(m - \frac{1}{2})} = 0, \end{aligned} \quad (2.74)$$

$$\begin{aligned} a_1 \sqrt{\ell(\ell+1) - (m - \frac{1}{2})(m + \frac{1}{2})} \\ + a_2 [\ell(\ell+1) + \frac{3}{4} - (m + \frac{1}{2}) - j(j+1)] = 0. \end{aligned} \quad (2.75)$$

Pour qu'une solution (a_1, a_2) non-nulle existe, il faut que le déterminant de ce système, $\det = [j + \ell + \frac{3}{2}] [j + \ell + \frac{1}{2}] [j - \ell + \frac{1}{2}] [j - \ell - \frac{1}{2}]$, s'annule. Ceci est le cas si (et seulement si) $j = \ell \pm \frac{1}{2}$. Dans le cas $j = \ell + \frac{1}{2}$, on trouve

$$a_1 = C \sqrt{\ell + m + \frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{\ell + m + \frac{1}{2}}}{\sqrt{2\ell + 1}}, \quad (2.76)$$

$$a_2 = C \sqrt{\ell - m + \frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{\ell - m + \frac{1}{2}}}{\sqrt{2\ell + 1}}, \quad (2.77)$$

ou C est d'abord une constante arbitraire qui a été fixé en requérant que $|n, j, m, \ell\rangle$ soit normalisé, $a_1^2 + a_2^2 = 1$. Nous obtenons

$$|n, j = \ell + \frac{1}{2}, m, \ell\rangle = R_{n,\ell}(r) \begin{pmatrix} a_1 Y_{\ell, m - \frac{1}{2}} \\ a_2 Y_{\ell, m + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \quad (2.78)$$

ce qui implique

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle_{j=\ell+\frac{1}{2}} &= \left(\begin{pmatrix} a_1 Y_{\ell, m - \frac{1}{2}} \\ a_2 Y_{\ell, m + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 Y_{\ell, m - \frac{1}{2}} \\ a_2 Y_{\ell, m + \frac{1}{2}} \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2(2\ell + 1)} [(\ell + m + \frac{1}{2}) - (\ell - m + \frac{1}{2})] = \frac{\hbar m}{2\ell + 1}. \end{aligned} \quad (2.79)$$

En procédant de manière similaire pour $j = \ell - \frac{1}{2}$, nous obtenons

$$\langle S_z \rangle_{j=\ell-\frac{1}{2}} = -\frac{\hbar m}{2\ell+1}. \quad (2.80)$$

D'après Eq. (2.64), le changement d'énergie induit par le terme "magnétique" est donné par $\Delta E = \hbar\omega m + \omega \langle S_z \rangle$, i.e.,

$$\Delta E_{\ell+\frac{1}{2},m,\ell} = \hbar\omega m \left(1 + \frac{1}{2\ell+1}\right), \quad (2.81)$$

$$\Delta E_{\ell-\frac{1}{2},m,\ell} = \hbar\omega m \left(1 - \frac{1}{2\ell+1}\right). \quad (2.82)$$

Les états $|n, j, \ell\rangle$ se divisent alors en $2j+1$ niveaux différents selon la valeur de m . Ce déplacement des niveaux d'énergie, qui résulte de l'application d'un faible champ magnétique, est appelée *l'effet Zeeman faible* (cf. laboratoire).

2.2.4 Para-hélium et ortho-hélium

Les particules à spin demi-entier satisfont toujours au principe d'exclusion de Pauli. Dans le cadre de la mécanique quantique non-relativiste, cette assertion relève d'un complet hasard. Par contre, dans le cadre de la théorie des champs quantiques, on peut montrer que le principe d'exclusion est indispensable si on requiert une énergie positive et (pour les fermions) une charge conservée (Le théorème de spin et statistique est un des plus fondamentaux résultats de la théorie des champs.).

Dans la section précédente, les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène ont été décrits en détails. Cette étude était considérablement simplifiée par le fait que l'atome d'hydrogène ne possède qu'un électron : le principe de Pauli n'intervient pas. Dans cette section, nous considérons l'atome d'hélium, i.e., un atome à deux électrons, pour lequel les simplifications précédentes ne se produisent pas.

L'espace d'Hilbert des deux électrons de l'hélium est donné par

$$P^{(a)} \left(\underbrace{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^6)}_{\mathcal{H}_o} \otimes \underbrace{\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2}_{\mathcal{H}_s} \right), \quad (2.83)$$

où $P^{(a)}$ correspond au projecteur sur les états qui sont antisymétriques entre l'échange du premier et du deuxième électron.

Nous considérons la base $u_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ et $u_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ de \mathbb{C}^2 . Les parties symétrique et antisymétrique de \mathcal{H}_s sont alors les espaces linéaires générés par les bases

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_s^{(s)} &: \left(u_+ \otimes u_+, \frac{1}{\sqrt{2}} [u_+ \otimes u_- + u_- \otimes u_+], u_- \otimes u_- \right), \\ \mathcal{H}_s^{(a)} &: \frac{1}{\sqrt{2}} [u_+ \otimes u_- - u_- \otimes u_+]. \end{aligned} \quad (2.84)$$

Il est clair que les espaces $\mathcal{H}_s^{(s)}$ et $\mathcal{H}_s^{(a)}$ sont invariants sous rotation. Une simple inspection (exercice) montre que le spin est $s=1$ sur $\mathcal{H}_s^{(s)}$ et $s=0$ sur $\mathcal{H}_s^{(a)}$ (C'est évident à cause de leur dimension avec la décomposition $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}} \otimes \mathcal{D}^{\frac{1}{2}} =$

$\mathcal{D}^1 \oplus \mathcal{D}^0$.)⁴. On a

$$\mathcal{H}^{(a)} = \mathcal{H}_o^{(s)} \otimes \underbrace{\mathcal{H}_s^{(a)}}_{s=0} \oplus \mathcal{H}_o^{(a)} \otimes \underbrace{\mathcal{H}_s^{(s)}}_{s=1}. \quad (2.85)$$

Considérons maintenant l'hamiltonien en négligeant le couplage spin-orbite,

$$H = H^{(0)} + H^{(P)}, \quad H^{(0)} = H^{(01)} + H^{(02)}, \quad (2.86)$$

$$\text{où } H^{(0i)} = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i}, \quad H^{(P)} = V = \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}. \quad (2.87)$$

Dans \mathcal{H}_o , le groupe des rotations agit comme

$$[\mathcal{U}_o(R)\Psi](\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \Psi(R^{-1}\mathbf{x}_1, R^{-1}\mathbf{x}_2), \quad (2.88)$$

ce qui montre clairement que $\mathcal{H}_o^{(s)}$ et $\mathcal{H}_o^{(a)}$ sont invariants sous rotation.

L'opérateur H est trivial dans le spin. Nous posons $H = H^{(s)} + H^{(a)}$ avec $H^{(s)} = P_o^{(s)} H P_o^{(s)}$ et $H^{(a)} = P_o^{(a)} H P_o^{(a)}$. En négligeant l'interaction avec le spin, un état donné reste toujours soit dans $\mathcal{H}_o^{(s)}$ ou $\mathcal{H}_o^{(a)}$. D'autre part, l'interaction spin-orbite ne génère pas de transition à l'ordre le plus bas. Les transitions de $\mathcal{H}_o^{(s)}$ en $\mathcal{H}_o^{(a)}$ sont sévèrement supprimées et les spectres de $H^{(s)}$ et $H^{(a)}$ sont pratiquement indépendants.

Nous considérons maintenant l'espace propre pour une valeur propre E de $H^{(s)}$ ou $H^{(a)}$. Nous supposons que cet espace porte une représentation irréductible de $SO(3)$, notée \mathcal{D}^ℓ , où ℓ est le moment cinétique orbital. L'espace propre de la valeur E sera noté $\mathcal{M}_o^{(s)}(\ell)$ ou $\mathcal{M}_o^{(a)}(\ell)$. L'espace propre de E dans $\mathcal{H}^{(a)}$ est alors $\mathcal{M}_o^{(s)}(\ell) \otimes \mathcal{H}_s^{(a)}$ ou $\mathcal{M}_o^{(a)}(\ell) \otimes \mathcal{H}_s^{(s)}$, et il porte la représentation $\mathcal{D}^\ell \otimes \mathcal{D}^0 = \mathcal{D}^\ell$ ou $\mathcal{D}^\ell \otimes \mathcal{D}^1 = \mathcal{D}^{\ell+1} \oplus \mathcal{D}^\ell \oplus \mathcal{D}^{\ell-1}$ de $SU(2)$.

Si on considère également le couplage spin-orbite, les valeurs de l'énergie de $H^{(a)}$ se divise en *triplet* avec moment cinétique $j = \ell + 1, \ell, \ell - 1$, tant que les énergies de $H^{(s)}$ restent des singulets non-perturbés.

Pour résumer nos principaux résultats, nous avons recours à la notation spectroscopique $^{(2s+1)}X(L)_J$ (cf. Annexe A.1) :

- *Para-hélium* : les états symétriques dans l'orbite sont des singulets, notés $^1S_0, ^1P_1, ^1D_2, \dots$, pour $j = \ell$.
- *Ortho-hélium* : les états antisymétriques dans l'orbite sont des triplets, notés $^3S_1, ^3P_{0,1,2}, ^3D_{1,2,3}, \dots$, pour $j = \ell - 1, \ell, \ell + 1$.

Du point de vue de la structure atomique, on peut donc en conclure que l'hélium se divise en deux types. Si les spins des électrons sont additionnés de telle manière à former un vecteur "spin total" nul, cela mène au para-hélium. Par contre, si les spins sont alignés, on obtient de l'ortho-hélium. A noter qu'il n'y a presque pas de transition entre les systèmes para-hélium et ortho-hélium. La division en triplet du spectre de l'ortho-hélium est appelée la *structure fine* de l'hélium.

Dans l'état fondamental, nous trouvons uniquement du para-hélium. En principe, des excitations de cet état fondamental devraient mener à du para-hélium

⁴Ce résultat est aussi valable (quoique la démonstration est non triviale) pour plus de deux électrons : d'après le théorème de Peter Weyl, le spin est uniquement déterminé par la classe de symétrie et vice-versa dans $\mathcal{H}_s = (\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$.

excité, i.e., la configuration de spin ne devrait pas changer. Toutefois, si l'excitation est obtenue par bombardement avec des électrons, il est possible qu'un électron de diffusion remplace un des électrons originels de l'atome d'hélium. Dans ce cas, il se peut que la configuration de spin de l'atome change, et que le para-hélium devienne de l'ortho-hélium.

Niveaux d'énergie

Nous voulons maintenant déterminer le spectre énergétique de l'hélium au premier ordre dans l'interaction des électrons. D'abord nous discutons l'ordre zéro, ie. nous négligeons la répulsion mutuelle des électrons, V . Dans cette approximation, les électrons sont indépendants ; les fonctions propres de $H^{(0)}$ sont donc les produits des fonctions propres obtenues pour l'atome d'hydrogène (avec $Z = 2$),

$$\left(H^{(01)} + H^{(02)} \right) \tilde{\Phi}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = E_{n_1, n_2} \tilde{\Phi}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), \quad (2.89)$$

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \Phi_{n_1, \ell_1, m_1}(\mathbf{x}_1) \Phi_{n_2, \ell_2, m_2}(\mathbf{x}_2), \quad (2.90)$$

avec valeurs propres

$$E_{n_1, n_2} = E_{n_1} + E_{n_2} = -\frac{m_e e^4 Z^2}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (2.91)$$

et multiplicité $n_1^2 n_2^2$. Ainsi, dans le modèle théorique où les deux électrons s'ignorent mutuellement, l'énergie la plus basse est

$$E_{1,1} = 2E_1 = -m_e c^2 (2\alpha)^2 = -108.8 \text{ eV}. \quad (2.92)$$

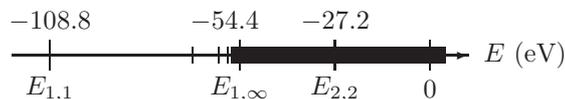
Ceci correspond à $(2 \times Z^2 = 8) \times$ l'énergie de l'atome d'hydrogène, qui est $E_0^H = -13.6 \text{ eV} = -1 \text{ Ry}$. Pour $\ell_1 = \ell_2$, $n_1 = n_2$ et $m_1 = m_2$, la fonction d'onde non-perturbée est évidemment symétrique. Si au moins un des nombres quantiques est différent, on a

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{n_1, \ell_1, m_1}(\mathbf{x}_1) \Phi_{n_2, \ell_2, m_2}(\mathbf{x}_2) + \Phi_{n_2, \ell_2, m_2}(\mathbf{x}_1) \Phi_{n_1, \ell_1, m_1}(\mathbf{x}_2)] \in \mathcal{H}_o^{(s)}, \quad (2.93)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{n_1, \ell_1, m_1}(\mathbf{x}_1) \Phi_{n_2, \ell_2, m_2}(\mathbf{x}_2) - \Phi_{n_2, \ell_2, m_2}(\mathbf{x}_1) \Phi_{n_1, \ell_1, m_1}(\mathbf{x}_2)] \in \mathcal{H}_o^{(a)}. \quad (2.94)$$

Ainsi, la valeur propre la plus basse est $E_{1,1} = 2E_1$ avec fonction propre en $\mathcal{H}_o^{(s)}(n_1, \ell_1, m_1) = (n_2, \ell_2, m_2) = (1, 0, 0)$. Les prochaines sont $E_{1,n} = E_1 + E_n$, $n \geq 2$, qui s'approchent de E_1 pour $n \rightarrow \infty$. En effet, le premier état excité est celui pour lequel un électron est dans son état fondamental ($n = 1$) et le second est élevé dans le premier état excité ($n = 2$), ce qui implique $E_{1,2} = E_1 + E_2 = -68.0 \text{ eV}$. Dans cette approximation, l'énergie de ionisation, i.e., l'énergie requise pour enlever un électron de son état fondamental et le porter à l'infini est $E_{ion} = E_{1,\infty} - E_{1,1} = 54.4 \text{ eV}$. Ainsi, le spectre continu commence dès que les énergies sont plus élevées que $E_1 = E_{1,\infty}$. En particulier, l'état excité pour lequel les deux électrons sont dans le niveau $n = 2$ possède l'énergie $E_{2,2} = E_{1,1}/4 = E_1/2 = -27.2 \text{ eV}$; cette valeur propre est à l'intérieur

du spectre continu. On s'attend donc à ce que la perturbation V , due à la répulsion mutuelle des électrons, dissolvent ces valeurs propres à l'intérieur du spectre continu, les $E_{n_1} + E_{n_2}$ avec $n_1 \geq 2$ et $n_2 \geq 2$.



Nous nous intéressons maintenant aux perturbations des valeurs propres $E_1 + E_n$ dues à l'interaction des électrons. Les fonctions propres non-perturbées sont

$$n > 1 : \Psi_{n,\ell,m} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{1,0,0} \cdot \Phi_{n,\ell,m} + \Phi_{n,\ell,m} \cdot \Phi_{1,0,0}] \in \mathcal{H}_o^{(s)} , \quad (2.95)$$

$$n = 1 : \Phi_{1,0,0} \cdot \Phi_{1,0,0} \in \mathcal{H}_o^{(s)} , \quad (2.96)$$

$$n > 1 : \chi_{n,\ell,m} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{1,0,0} \cdot \Phi_{n,\ell,m} - \Phi_{n,\ell,m} \cdot \Phi_{1,0,0}] \in \mathcal{H}_o^{(a)} . \quad (2.97)$$

Le principe de Pauli élimine le triplet pour l'état fondamental (car la partie spatiale de la fonction d'onde est nécessairement symétrique). Pour l'ortho-hélium $\chi_{n,\ell,m} \otimes u$, $u \in \mathcal{H}_s^{(s)}$, on a $j = \ell + 1$, ℓ , $\ell - 1$, tandis que pour le para-hélium, on a $j = \ell$. Les niveaux $E_1 + E_n$ sont identiques pour toutes les valeurs $\ell = 0, 1, \dots, n - 1$. L'interaction des deux électrons (i.e., la perturbation) éliminera cette dégénérescence. Au premier ordre, on obtient

$$\Delta E_{n,\ell}^{(a)} = (\chi_{n,\ell,m}, V \chi_{n,\ell,m}) = C_{n,\ell} - A_{n,\ell} , \quad n > 1 , \quad (2.98)$$

$$\Delta E_{n,\ell}^{(s)} = (\Psi_{n,\ell,m}, V \Psi_{n,\ell,m}) = C_{n,\ell} + A_{n,\ell} , \quad n \geq 1 , \quad (2.99)$$

où $C_{n,\ell}$ est l'énergie de l'interaction Coulomb,

$$C_{n,\ell} = e^2 \int \frac{|\Phi_1(\mathbf{x}_1)|^2 |\Phi_{n,\ell,m}(\mathbf{x}_2)|^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} d^3x_1 d^3x_2 , \quad (2.100)$$

et $A_{n,\ell}$ représente une "intégrale d'échange",

$$A_{n,\ell} = e^2 \int \frac{\Phi_1(\mathbf{x}_1) \Phi_{n,\ell,m}(\mathbf{x}_2) \bar{\Phi}_1(\mathbf{x}_2) \bar{\Phi}_{n,\ell,m}(\mathbf{x}_1)}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} d^3x_1 d^3x_2 . \quad (2.101)$$

Dans les exercices vous montrez que $A_{n,\ell} > 0$. Le signe de $\Delta E_{n,\ell}^{(s,a)}$ peut se comprendre intuitivement. Pour une fonction d'onde symétrique $\Psi_{n,\ell,m}$, les électrons préfèrent être proches, ce qui augmente l'énergie de la répulsion. Par contre, pour l'ortho-hélium $\chi_{n,\ell,m}$, les électrons tendent à se distancier l'un de l'autre, ce qui réduit l'énergie de Coulomb.

Le couplage spin-orbite (*structure fine*) divise encore les lignes spectrales $E_{\ell,m}^{(a)}$ de l'ortho-hélium en trois niveaux avec $j = \ell + 1$, ℓ , $\ell - 1$.

2.2.5 Atome d'hydrogène : structure hyperfine

Dans les sections précédentes, nous avons discuté la structure fine de l'atome d'hydrogène et de l'hélium. Cette levée partielle de la dégénérescence des niveaux

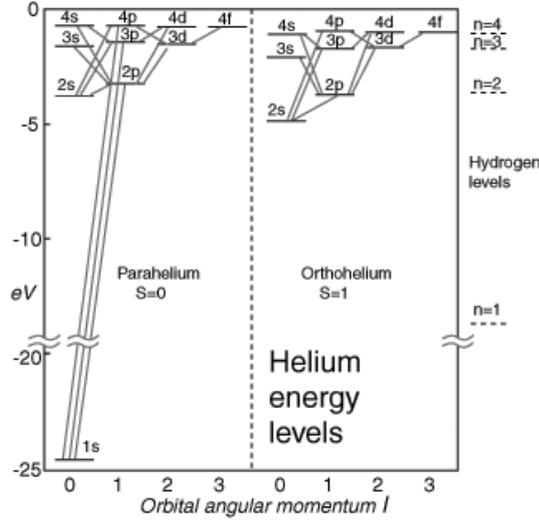


FIG. 2.2 – Les niveaux d'énergie de l'atome d'hélium exhibent quelques unes des caractéristiques propres aux atomes possédant plusieurs électrons. On suppose qu'un électron est dans l'état fondamental, l'état 1S_0 . L'autre électron, qui se trouve dans un niveau supérieur, peut avoir son spin soit anti-parallèle à celui dans l'état fondamental ($S = 0$, état singulet, para-hélium), soit parallèle à celui dans l'état fondamental ($S = 1$, état triplet, ortho-hélium). L'énergie de liaison du deuxième électron est indiquée suivant l'axe vertical.

atomiques est due à l'interaction du spin avec le moment cinétique orbital. Par contre, les lignes spectrales des atomes qui résultent des interactions du moment magnétique du noyau avec les couches électroniques sont collectivement appelées *structure hyperfine*. Puisque le moment magnétique du nucléon est petit en comparaison de ceux des électrons, cette interaction spin-spin est très faible; les intervalles d'énergie résultants de cette séparation sont donc très petits par comparaison avec ceux de la structure fine. Ainsi, la structure hyperfine doit être considérée séparément dans chaque composante de la structure fine.

Nous étudions désormais la variation d'énergie de l'électron d'un atome d'hydrogène induite par le champ magnétique dipolaire du noyau⁵. Si on omet le couplage spin-orbite $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ donnant lieu à la structure fine, l'hamiltonien de l'électron dans le champ du proton est (cf. (2.55))

$$H = H_o + H_s = \frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}_I \right)^2 + V(r) - \frac{e}{m_e c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_I . \quad (2.102)$$

Comme le champ électromagnétique créé par le proton est faible, on peut sans autre négliger le terme diamagnétique en \mathbf{A}^2 . Ainsi, nous posons

$$H^{(0)} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V(r) , \quad H^{(P)} = \frac{e}{m_e c} (i\hbar \mathbf{A}_I \cdot \nabla - \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_I) . \quad (2.103)$$

⁵Les quantités reliées au noyau de l'atome d'hydrogène, i.e., au proton, se distinguent par un indice I qui indique ici le spin du noyau.

Soit $\boldsymbol{\mu}_I$ le moment dipolaire magnétique du noyau. Nous avons (dans la jauge de Coulomb)

$$\mathbf{B}_I = \nabla \wedge \mathbf{A}_I, \quad \mathbf{A}_I = \boldsymbol{\mu}_I \wedge \mathbf{x}/r^3 = -\boldsymbol{\mu}_I \wedge \nabla(1/r), \quad (2.104)$$

ce qui implique que les deux contributions à la perturbation de l'hamiltonien idéal sont

$$i\hbar(\mathbf{A}_I \cdot \nabla) = \frac{i\hbar}{r^3}(\boldsymbol{\mu}_I \wedge \mathbf{x}) \cdot \nabla = \frac{i\hbar}{r^3}\boldsymbol{\mu}_I \cdot (\mathbf{x} \wedge \nabla) = -\frac{1}{r^3}\boldsymbol{\mu}_I \cdot \mathbf{L}, \quad (2.105)$$

$$\begin{aligned} -\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_I &= \mathbf{S} \cdot [\nabla \wedge (\boldsymbol{\mu}_I \wedge \nabla(1/r))] , \\ &= \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\mu}_I \Delta(1/r) - (\boldsymbol{\mu}_I \cdot \nabla)(\mathbf{S} \cdot \nabla(1/r)), \end{aligned} \quad (2.106)$$

et donc

$$H^{(P)} = -\frac{e}{m_e c} \left[\frac{1}{r^3} \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\mu}_I - \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\mu}_I \Delta(1/r) + (\boldsymbol{\mu}_I \cdot \nabla)(\mathbf{S} \cdot \nabla(1/r)) \right]. \quad (2.107)$$

Les trois contributions à $H^{(P)}$ peuvent être interprétée de la façon suivante :

- Le premier terme (qui provient de $\mathbf{A}_I \cdot \nabla$) correspond au couplage entre le moment magnétique nucléaire $\boldsymbol{\mu}_I$ et le champ magnétique $\mathbf{B}_I = \frac{e\mathbf{L}}{m_e r^3}$ créé par la boucle de courant associée à la rotation de l'électron.
- Les deux derniers termes proviennent du couplage entre le champ magnétique dû au spin du noyau et le spin de l'électron, $\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_I$. La singularité à l'origine du potentiel vecteur \mathbf{A}_I mène à une fonction δ , $\Delta(1/r) = -4\pi\delta^3(\mathbf{x})$. Ceci vient du fait que nous avons négligé l'extension spatiale du noyau. Toutefois, nous verrons que les énergies associées avec ces termes restent toujours finies (cf. la discussion dans [12]).

Cas $\ell = 0$

Nous considérons tout d'abord les états s (i.e., avec $\ell = 0$) dont la fonction d'onde est purement radiale, $\Psi = \Psi(r)$. Dans ce cas, une intégration par parties donne pour le troisième terme

$$\begin{aligned} \langle (\boldsymbol{\mu}_I \cdot \nabla)(\mathbf{S} \cdot \nabla(1/r)) \rangle &= \int d^3x |\Psi(r)|^2 \boldsymbol{\mu}_I \cdot \nabla(\mathbf{S} \cdot \nabla(1/r)), \\ &= -\mu_{Ii} S_j \int d^3x (\partial_i |\Psi(r)|^2) \partial_j(1/r) \\ &= -\frac{4\pi}{3} \boldsymbol{\mu}_I \cdot \mathbf{S} |\Psi(0)|^2. \end{aligned} \quad (2.108)$$

Pour le deuxième terme de $H^{(P)}$ nous utilisons $\Delta(1/r) = -4\pi\delta^3$, tandis que le premier terme est identiquement nul pour les états s . Au premier ordre, nous obtenons alors

$$\langle \Psi, H^{(P)} \Psi \rangle = \langle H^{(P)} \rangle_{\Psi} = \Delta E = -\frac{8\pi}{3} (\boldsymbol{\mu}_s \cdot \boldsymbol{\mu}_I) |\Psi(0)|^2, \quad (2.109)$$

où nous avons introduit $\boldsymbol{\mu}_s = \frac{e}{m_e c} \mathbf{S}$. Cette énergie est due à une "interaction de contact". Si $Z|e|$ est la charge du noyau, \mathbf{I} son spin et g_I le facteur gyromagnétique, on peut encore introduire

$$\boldsymbol{\mu}_I = g_I \frac{Z\mu_N}{\hbar} \mathbf{I} \quad \text{avec} \quad \mu_N = \frac{|e|\hbar}{2m_N c}, \quad (2.110)$$

et m_N est la masse du noyau. Finalement, en introduisant la constante de structure fine $\alpha = e^2/(\hbar c)$ et en utilisant que $|\Psi(0)|^2 = (\frac{\alpha Z m_e c}{n\hbar})^3$, on trouve

$$\Delta E = -\frac{16\pi}{3} g_I Z \mu_N \mu_e |\Psi(0)|^2 \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}}{\hbar^2} \quad (2.111)$$

$$= \frac{4}{3} g_I \frac{m_e}{m_N} (Z\alpha)^4 \frac{m_e c^2}{n^3} \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}}{\hbar^2} . \quad (2.112)$$

Soit $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{S}$ le moment cinétique total (pour $\ell = 0$ c'est la même chose que le spin total). On a alors $\mathcal{D}^I \otimes \mathcal{D}^{\frac{1}{2}} = \mathcal{D}^{I+\frac{1}{2}} \oplus \mathcal{D}^{I-\frac{1}{2}}$, et $F = I \pm \frac{1}{2}$, ce qui implique

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}}{\hbar^2} &= \frac{1}{2} \left[F(F+1) - I(I+1) - \frac{3}{4} \right] \\ &= \begin{cases} \frac{1}{2}I & \text{pour } F = I + \frac{1}{2}, \\ -\frac{1}{2}(I+1) & \text{pour } F = I - \frac{1}{2}. \end{cases} \end{aligned} \quad (2.113)$$

La différence d'énergie entre ces deux niveaux pour des électrons s ($\ell = 0$) est alors

$$E_{n,\ell=0}^{F=I+\frac{1}{2}} - E_{n,\ell=0}^{F=I-\frac{1}{2}} = \frac{4}{3} g_I \frac{m_e}{m_N} (Z\alpha)^4 \frac{m_e c^2}{n^3} \left(I + \frac{1}{2} \right) . \quad (2.114)$$

Pour l'hydrogène, l'état fondamental ($I = \frac{1}{2}$) se divise en un singulet $F = 0$, et un triplet $F = 1$, avec une différence d'énergie $\hbar\nu$, où $\nu = 1420$ Hz. C'est la "ligne 21-centimètre", $\lambda = c\nu^{-1} = 21.4$ cm, qui est très utilisée en astronomie.

Cas $\ell \neq 0$

Dans ce cas, nous avons $\Psi_{n,\ell,m}(0) = 0$ et le "terme de contact" (2.109) ne donne aucune contribution. Alors, Eq. (2.107) se réduit à

$$H^{(P)} = -\frac{e}{m_e c} Z \mu_N \frac{g_I}{\hbar} \frac{1}{r^3} [\mathbf{L} \cdot \mathbf{I} - \mathbf{S} \cdot \mathbf{I} + 3(\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{x}})(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{I})] . \quad (2.115)$$

Nous posons $\mathbf{G} = \mathbf{L} - \mathbf{S} + 3(\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{x}})\hat{\mathbf{x}}$, qui ne dépend que de la fonction d'onde de l'électron. D'après le théorème de Wigner-Eckart (voir, e.g. [12], Chap. X, complément D), \mathbf{G} doit être un multiple de $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Si on pose $\mathbf{G} = k\mathbf{J}$, on a $\mathbf{J} \cdot \mathbf{G} = \hbar^2 j(j+1)k$. Alors,

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{G} = k\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} = \frac{(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})(\mathbf{J} \cdot \mathbf{G})}{\hbar^2 j(j+1)} . \quad (2.116)$$

D'autre part, nous avons dans l'état $|n, j, F, I\rangle$, où $\mathbf{F} = \mathbf{L} + \mathbf{S} + \mathbf{I} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} = \frac{1}{2}\hbar^2 [F(F+1) - I(I+1) - j(j+1)] , \quad (2.117)$$

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{G} = \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2 + 3(\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{x}})^2 = \hbar^2 \left[\ell(\ell+1) - \frac{3}{4} + \frac{3}{4} \right] = \hbar^2 \ell(\ell+1) , \quad (2.118)$$

où F est le moment cinétique total de l'atome. Ainsi, on obtient finalement

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{G} = \frac{1}{2}\hbar^2 \frac{\ell(\ell+1)}{j(j+1)} [F(F+1) - I(I+1) - j(j+1)] . \quad (2.119)$$

Pour $\ell > 0$, cette séparation hyperfine donne alors

$$\Delta E_{n,\ell>0} = -\frac{e}{m_e c} Z \mu_N g_I \frac{\hbar}{2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n,\ell} \frac{\ell(\ell+1)}{j(j+1)} \times [F(F+1) - I(I+1) - j(j+1)] , \quad (2.120)$$

avec $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n,\ell}$ de l'ordre de $a^{-3} = (Z/a_0)^3 = \left[\frac{m_e c}{\hbar} (Z\alpha) \right]^3$. Ainsi, les transitions $\Delta E_{n,\ell>0} \sim (\alpha Z)^4 \frac{m_e}{m_N} m_e c^2 \sim \Delta E_{n,0}$ ont aussi des fréquences dans la bande radio. La structure hyperfine a la même puissance en α que la structure fine mais elle est supprimée par un facteur $\frac{m_e}{m_N}$. Pour l'hydrogène ceci correspond à des énergies environ 2000 fois inférieures à celles de la structure fine.

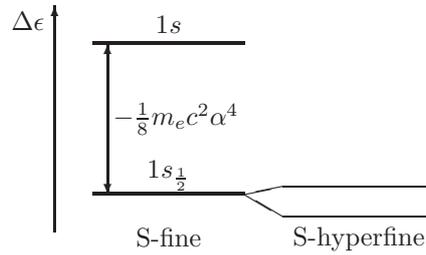


FIG. 2.3 – Structure hyperfine du niveau $n = 1$ de l'atome d'hydrogène. Il n'existe pas de structure fine du niveau $n = 1$; seul un déplacement énergétique global du niveau apparaît, car j ne peut prendre qu'une seule valeur, $j = \frac{1}{2}$. Par contre, lorsque l'on tient compte du couplage hyperfin, le niveau $1s_{\frac{1}{2}}$ se scinde en deux niveaux hyperfins. La transition hyperfine entre ces deux niveaux est la source de la raie de longueur d'onde 21cm utilisée en radio-astronomie.

2.3 Théorie des perturbations avec dépendance temporelle

Jusqu'ici, nous avons étudié la variation d'énergie et de l'état propre sous un petit changement de l'hamiltonien. Cette perturbation était supposée constante. Maintenant, nous abordons un problème plus complexe : nous étudions les *transitions* entre deux états dûs à une perturbation qui dépend du temps, pour un système ayant un nombre quelconque de niveaux. En général, une résolution exacte n'est pas possible, et nous aurons recours à des méthodes d'approximation. Dans le cas où l'état initial est couplé à un continuum d'états finals, nous dériverons une formule importante, la *règle d'or* de Fermi.

2.3.1 Formalisme

Nous considérons un système avec hamiltonien

$$H(t) = H^{(0)} + H^{(P)}(t) , \quad (2.121)$$

où $H^{(0)}$ est l'hamiltonien d'une équation de Schrödinger que l'on sait résoudre. Nous dénotons par (Ψ_n) le système complet d'états propres de $H^{(0)}$ d'énergie E_n , tel que $H^{(0)}\Psi_n = E_n\Psi_n$.

Sachant que le système quantique se trouve dans un état propre Ψ_n à l'instant t_0 , nous voulons déterminer son état dynamique à l'instant t . Dans la représentation de Schrödinger, ceci revient donc à déterminer l'opérateur d'évolution $\mathcal{U}(t, t_0)$ qui caractérise l'évolution temporelle des états dynamiques,

$$\Psi(t) = \mathcal{U}(t, t_0)\Psi_n . \quad (2.122)$$

La probabilité de trouver le système dans l'état Ψ_m au temps t est alors donnée par

$$\mathcal{P}_{n \rightarrow m}(t) = |\langle \Psi_m, \mathcal{U}(t, t_0)\Psi_n \rangle|^2 . \quad (2.123)$$

Evidemment, $\mathcal{P}_{n \rightarrow n}(t)$ donne la probabilité que l'état du système soit à nouveau dans l'état Ψ_n au temps t .

Avant de déterminer sa forme générale, nous rappelons quelques propriétés de l'opérateur d'évolution temporelle, $\mathcal{U}(t, t_0)$. Dans l'équation (2.122), l'état Ψ_n est indépendant du temps, ce qui implique que l'équation de Schrödinger peut être réduite à

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \mathcal{U}(t, t_0) &= H(t)\mathcal{U}(t, t_0) , \\ \mathcal{U}(t, t) &= \mathcal{U}(t_0, t_0) = \mathbb{I} . \end{aligned} \quad (2.124)$$

Compte tenu de la condition initiale, cette équation différentielle du premier ordre spécifie complètement notre opérateur \mathcal{U} . Une définition équivalente est alors donnée par l'équation intégrale

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \mathbb{I} + (i\hbar)^{-1} \int_{t_0}^t dt' H(t')\mathcal{U}(t', t_0) . \quad (2.125)$$

D'autre part, comme $H(t)$ est auto-adjoint, l'opérateur \mathcal{U} doit être unitaire⁶,

$$\mathcal{U}(t, t')\mathcal{U}^*(t, t') = \mathcal{U}^*(t, t')\mathcal{U}(t, t') = \mathbb{I} . \quad (2.126)$$

L'unitarité peut aussi être vue comme une conséquence de l'invariance temporelle de la norme d'un vecteur d'état. De plus, $\mathcal{U}(t, t')$ est un semi-groupe, i.e., nous avons la loi de composition (à vérifier!)

$$\mathcal{U}(t, t') = \mathcal{U}(t, t'')\mathcal{U}(t'', t') , \quad (2.127)$$

où t'' fait office de temps intermédiaire, $t' < t'' < t$. Mais ceci implique qu'un renversement de l'axe du temps correspond à une inversion de l'opérateur d'évolution lui-même,

$$\mathcal{U}(t, t') = \mathcal{U}^{-1}(t', t) = \mathcal{U}^*(t', t) . \quad (2.128)$$

Maintenant, nous voulons trouver une expression formelle pour l'opérateur d'évolution \mathcal{U} . Nous allons utiliser la propriété que l'hamiltonien de notre système se décompose en deux parties, $H(t) = H^{(0)} + H^{(P)}(t)$. L'idée directrice est de séparer l'évolution due à $H^{(0)}$ qui est supposée connue et de trouver le changement de l'évolution temporelle dû à la perturbation $H^{(P)}$. Comme cette dernière est petite, il est possible de trouver un développement en série de puissance.

⁶En prenant la dérivée de $\mathcal{U}\mathcal{U}^{-1} = \mathbb{I}$ nous obtenons $(\partial_t \mathcal{U})\mathcal{U}^{-1} = -\mathcal{U}\partial_t \mathcal{U}^{-1}$. Ici nous insérons (2.124) pour $\partial_t \mathcal{U}$, ce qui donne $H(t) = -i\hbar \mathcal{U}\partial_t \mathcal{U}^{-1}$ et alors $i\hbar \partial_t \mathcal{U}^{-1} = \mathcal{U}^{-1}H$. Mais l'hermitean conjugué de (2.124) est $-i\hbar \mathcal{U}^* = \mathcal{U}^*H$. Donc \mathcal{U}^{-1} et \mathcal{U}^* satisfont la même équation différentielle et la même condition initiale, $\mathcal{U}^*(t_0) = \mathcal{U}^{-1}(t_0) = \mathbb{I}$. Ces deux opérateurs sont alors identiques.

L'hamiltonien non-perturbé $H^{(0)}$ ne dépend pas du temps et nous connaissons l'opérateur d'évolution temporelle correspondant, $\mathcal{U}_0(t, t_0)$. En effet, l'équation de Schrödinger implique

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\mathcal{U}_0(t, t_0) &= H^{(0)}\mathcal{U}_0(t, t_0) , \\ \mathcal{U}_0(t, t) &= \mathcal{U}_0(t_0, t_0) = \mathbb{I} . \end{aligned} \quad (2.129)$$

Par intégration, on obtient $\mathcal{U}_0(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H^{(0)}(t-t_0)}$. Pour les états propres Ψ_n d'énergie E_n , nous avons

$$\Psi_n(t) = \mathcal{U}_0(t, t_0)\Psi_n(t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}\Psi_n(t_0) . \quad (2.130)$$

Les états stationnaires $\Psi_n(t)$ et $\Psi_n(t_0)$ ne diffèrent donc l'un de l'autre que d'un facteur de phase global, $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}$, et sont donc physiquement indiscernables.

Nous voulons maintenant déterminer l'opérateur d'évolution temporelle associé à la perturbation de l'hamiltonien, $H^{(P)}$. En effet, puisqu'on sait construire $\mathcal{U}_0(t, t_0)$, pour déterminer \mathcal{U} il suffit de construire l'opérateur unitaire

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) := \mathcal{U}_0^*(t, t_0)\mathcal{U}(t, t_0) , \quad (2.131)$$

où \mathcal{U}_I est l'opérateur d'évolution des états dans la représentation intermédiaire (ou représentation d'interaction). L'unitarité de \mathcal{U}_I découle de celle de \mathcal{U}_0 et \mathcal{U} . D'après Eqs. (2.124), (2.129) et (2.131), il suit que

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\mathcal{U}_I &= (-i\hbar\partial_t\mathcal{U}_0)^*\mathcal{U} + \mathcal{U}_0^*(i\hbar\partial_t\mathcal{U}) \\ &= \left(-H^{(0)}\mathcal{U}_0\right)^*\mathcal{U} + \mathcal{U}_0^*(H\mathcal{U}) \\ &= -\mathcal{U}_0^*H^{(0)}\mathcal{U} + \mathcal{U}_0^*H\mathcal{U} \\ &= \mathcal{U}_0^*\left(H - H^{(0)}\right)\mathcal{U} . \end{aligned} \quad (2.132)$$

Si nous posons

$$\begin{aligned} H_I(t) &= \mathcal{U}_0^*(t, t_0)\left(H(t) - H^{(0)}\right)\mathcal{U}_0(t, t_0) \\ &= \mathcal{U}_0^*(t, t_0)H^{(P)}(t)\mathcal{U}_0(t, t_0) . \end{aligned} \quad (2.133)$$

nous obtenons

$$i\hbar\partial_t\mathcal{U}_I = H_I\mathcal{U}_I . \quad (2.134)$$

L'hamiltonien $H_I(t)$ correspond donc à la "transformée" de $H^{(P)}(t)$ sous la transformation $\mathcal{U}_0(t, t_0)$. Finalement, \mathcal{U}_I qui est l'opérateur d'évolution dans la représentation intermédiaire est aussi déterminé par l'équation différentielle

$$i\hbar\partial_t\mathcal{U}_I(t, t_0) = H_I(t)\mathcal{U}_I(t, t_0) , \quad \text{avec condition initiale} \quad (2.135)$$

$$\mathcal{U}_I(t, t) = \mathcal{U}_I(t_0, t_0) = \mathbb{I} . \quad (2.136)$$

Ou, ce qui revient au même, par l'équation intégrale

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) = \mathbb{I} + (i\hbar)^{-1} \int_{t_0}^t dt' H_I(t')\mathcal{U}_I(t', t_0) . \quad (2.137)$$

Remarques : (Représentations de Schrödinger, Heisenberg et intermédiaire)

Comme vous avez appris en mécanique quantique I, toutes les prévisions de la mécanique quantique (e.g., probabilité, valeur moyenne) s'expriment comme des produits scalaires ou des éléments de matrice d'opérateurs. La dépendance temporelle d'une valeur d'expectation d'une observable A dans un système qui est initialement dans l'état Ψ et qui obéit à l'évolution temporelle $\mathcal{U}(t, t_0)$ est alors

$$\langle A \rangle(t) = (\mathcal{U}(t, t_0)\Psi, A\mathcal{U}(t, t_0)\Psi) \quad \text{repr. de Schrödinger} \quad (2.138)$$

$$= (\Psi, \mathcal{U}^*(t, t_0)A\mathcal{U}(t, t_0)\Psi) \quad \text{repr. de Heisenberg} \quad (2.139)$$

$$\begin{aligned} &= (\mathcal{U}_0^*(t, t_0)\mathcal{U}(t, t_0)\Psi, \mathcal{U}_0^*(t, t_0)A\mathcal{U}(t, t_0)\Psi) \\ &= (\mathcal{U}_0^*(t, t_0)\mathcal{U}(t, t_0)\Psi, \mathcal{U}_0^*(t, t_0)A\mathcal{U}_0(t, t_0)\mathcal{U}_0^*(t, t_0)\mathcal{U}(t, t_0)\Psi) \\ &= (\mathcal{U}_I(t, t_0)\Psi, A_I\mathcal{U}_I(t, t_0)\Psi) \quad , \quad \text{repr. intermédiaire} \quad (2.140) \end{aligned}$$

où nous avons posé $A_I(t) = \mathcal{U}_0^*(t, t_0)A\mathcal{U}_0(t, t_0)$ pour la dernière égalité. On peut donc absorber la dépendance temporelle du système soit dans l'état Ψ (représentation de Schrödinger), soit dans les opérateurs (représentation de Heisenberg), soit la partie non-perturbée (libre) dans les opérateurs et la partie perturbée (interaction) dans les états (représentation intermédiaire). Ceci motive les trois "représentations" suivantes pour un système quantique :

★ *Représentation de Schrödinger :*

Les opérateurs position, impulsion, énergie cinétique d'une particule, i.e., les observables, ne dépendent pas explicitement du temps. L'évolution du système est entièrement contenue dans celle du vecteur d'état, et s'obtient à partir de l'équation de Schrödinger, $\Psi(t) = \mathcal{U}(t, t_0)\Psi(t_0)$.

★ *Représentation de Heisenberg :*

L'état est indépendant du temps. La transformation unitaire ne s'applique que sur les opérateurs, i.e., ce sont les observables qui portent alors la dépendance temporelle, $A(t) = \mathcal{U}^*(t, t_0)A(t_0)\mathcal{U}(t, t_0)$.

★ *Représentation intermédiaire (aussi appelée représentation d'interaction) :*

Le vecteur d'état $\Psi(t)$ s'exprime en fonction de l'état initial $\Psi(t_0)$ par la relation $\Psi(t) = \mathcal{U}_I(t, t_0)\Psi(t_0)$, ou $\mathcal{U}_I(t, t_0)$ représente l'opérateur d'évolution des états dans la représentation intermédiaire. Les opérateurs évoluent d'après l'évolution "libre" ou non-perturbée, $A_I(t) = \mathcal{U}_0^*(t, t_0)A(t_0)\mathcal{U}_0(t, t_0)$.

La série de Dyson

L'équation intégrale (2.137) peut être formellement résolue par itérations. En substituant l'expression de gauche pour $\mathcal{U}_I(t', t_0)$ dans l'intégrale dans l'équation (2.137), nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_I(t, t_0) &= \mathbb{I} + (i\hbar)^{-1} \int_{t_0}^t dt' H_I(t') \left[\mathbb{I} + (i\hbar)^{-1} \int_{t_0}^{t'} dt'' H_I(t'') \mathcal{U}_I(t'', t_0) \right] \\ &= \mathbb{I} + (i\hbar)^{-1} \int_{t_0}^t H_I(t') dt' \\ &\quad + (i\hbar)^{-2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_I(t') H_I(t'') \mathcal{U}_I(t'', t_0) . \quad (2.141) \end{aligned}$$

Par itérations successives, on trouve un développement en puissance de H_I :

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{U}_I^{(n)}(t, t_0) , \quad (2.142)$$

$$\mathcal{U}_I^{(n)}(t, t_0) = (i\hbar)^{-n} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H_I(t_1) \cdots H_I(t_n) . \quad (2.143)$$

Evidemment, cette série converge d'autant plus rapidement que H_I (ou $H^{(P)}$) est petit. Souvent, dans des applications, nous ne calculons que le premier membre. Cette approximation s'appelle "l'approximation de Born". La série itérative (2.142) ressemble fortement à l'expansion en série de l'exponentielle, mise à part l'absence du pré-facteur $1/(n!)$. Ceci provient du fait que $[H_I(t_1), H_I(t_2)] \neq 0$, ce qui nous empêche d'échanger les termes dans l'expansion et de pondérer le n -ième terme par $1/(n!)$. Pour obtenir une expression compacte pour $\mathcal{U}_I(t, t_0)$, nous définissons

$$\theta(t_1, \dots, t_n) = \begin{cases} 1 , & \text{si } t_1 > t_2 > \dots > t_n , \\ 0 , & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.144)$$

Ceci nous permet d'introduire l'opérateur chronologique

$$\begin{aligned} T(H_I(t_1), \dots, H_I(t_n)) &= \sum_{\pi \in \mathcal{S}_n} \theta(t_{\pi(1)}, \dots, t_{\pi(n)}) H_I(t_{\pi(1)}) \cdots H_I(t_{\pi(n)}) \\ &= H_I(t_{i_1}) \cdots H_I(t_{i_n}) \quad \text{avec } t_{i_1} > t_{i_2} > \dots > t_{i_n} . \end{aligned} \quad (2.145)$$

Ici \mathcal{S}_n est le groupe de permutation de n éléments et la somme porte sur toutes les permutations. Ainsi, nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_I^{(n)}(t, t_0) &= (i\hbar)^{-n} \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t_1} dt_n \theta(t_1, \dots, t_n) H_I(t_1) \cdots H_I(t_n) \\ &= \frac{(i\hbar)^{-n}}{n!} \int_{[t_0, t]^n} dt_1 \cdots dt_n \times \\ &\quad \sum_{\pi \in \mathcal{S}_n} \theta(t_{\pi(1)}, \dots, t_{\pi(n)}) H_I(t_{\pi(1)}) \cdots H_I(t_{\pi(n)}) \\ &= \frac{(i\hbar)^{-n}}{n!} \int_{[t_0, t]^n} dt_1 \cdots dt_n T(H_I(t_1) \cdots H_I(t_n)) . \end{aligned} \quad (2.146)$$

L'inclusion de l'opérateur chronologique se comprend aisément par le fait que la dérivée d'un opérateur de la forme $e^{F(t)}$ n'est pas égale à $F'(t)e^{F(t)}$, si $F(t_1)$ ne commute pas avec $F(t_2)$. Insérant Eq. (2.146) dans Eq. (2.142), nous obtenons la *série de Dyson* pour l'opérateur d'évolution :

$$\boxed{\mathcal{U}_I(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\hbar)^{-n}}{n!} \int_{[t_0, t]^n} dt_1 \cdots dt_n T(H_I(t_1) \cdots H_I(t_n)) .} \quad (2.147)$$

Ce dernier résultat est souvent écrit sous forme symbolique

$$\boxed{\mathcal{U}_I(t, t_0) = T \left[\exp \left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_I(t') \right) \right] .} \quad (2.148)$$

La série de Dyson joue un rôle très important dans la théorie de la diffusion (cf. Chapitre 3) et dans la théorie des champs quantiques.

Probabilité de transition

Supposons qu'à l'instant initial t_0 le système se trouve dans l'un des états propres de $H^{(0)}$, par exemple Ψ_m . Nous voulons calculer $\mathcal{P}_{m \rightarrow m'}(t)$, i.e., la probabilité que le système se trouve à l'instant t dans un autre état propre de $H^{(0)}$, $\Psi_{m'}$. Par définition, la probabilité de transition est

$$\mathcal{P}_{m \rightarrow m'}(t) = |(\Psi_{m'}, \mathcal{U}(t, t_0)\Psi_m)|^2 . \quad (2.149)$$

Si la perturbation de l'hamiltonien était nulle, $H^{(P)} = 0$, nous avons démontré (cf. Eq. (2.130)) que les états propres ne diffèrent que par une phase, $\Psi_m(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_m(t-t_0)}\Psi_m(t_0)$, ce qui implique que $\mathcal{P}_{m \rightarrow m'}(t)$ serait nulle si $m' \neq m$. Si $H^{(P)} \neq 0$, par contre, nous pouvons développer Eq. (2.149) en série de puissance de $H^{(P)}$ à l'aide du développement Eq. (2.142). En effet, d'après Eq. (2.131), nous avons

$$\begin{aligned} (\Psi_{m'}, \mathcal{U}(t, t_0)\Psi_m) &= (\Psi_{m'}, \mathcal{U}_0(t, t_0)\mathcal{U}_I(t, t_0)\Psi_m) \\ &= \left(\Psi_{m'}, \mathcal{U}_0(t, t_0) \left[\mathbb{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{U}_I^{(n)}(t, t_0) \right] \Psi_m \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (\Psi_{m'}, \mathcal{U}_0(t, t_0)\mathcal{U}_I^{(n)}(t, t_0)\Psi_m) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (\Psi_{m'}, \mathcal{U}^{(n)}(t, t_0)\Psi_m) , \end{aligned} \quad (2.150)$$

où nous avons introduit $\mathcal{U}^{(n)}(t, t_0) = \mathcal{U}_0(t, t_0)\mathcal{U}_I^{(n)}(t, t_0)$ et $\mathcal{U}_I^{(0)}(t, t_0) = \mathbb{I}$. Les contributions d'ordre 0 et 1 sont alors

$$(\Psi_{m'}, \mathcal{U}_0(t, t_0)\Psi_m) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_m(t-t_0)}\delta_{mm'} , \quad (2.151)$$

$$\begin{aligned} (\Psi_{m'}, \mathcal{U}^{(1)}(t, t_0)\Psi_m) &= (\Psi_{m'}, \mathcal{U}_0(t, t_0)\mathcal{U}_I^{(1)}(t, t_0)\Psi_m) \\ &= (i\hbar)^{-1} \int_{t_0}^t dt' (\mathcal{U}_0^*(t, t_0)\Psi_{m'}, H_I(t')\Psi_m) \\ &= (i\hbar)^{-1} \int_{t_0}^t dt' (\mathcal{U}_0^*(t, t_0)\Psi_{m'}, \mathcal{U}_0^*(t', t_0)H^{(P)}(t')\mathcal{U}_0(t', t_0)\Psi_m) \\ &= (i\hbar)^{-1} \int_{t_0}^t dt' e^{-\frac{i}{\hbar}E_{m'}(t-t_0)}e^{+\frac{i}{\hbar}E_{m'}(t'-t_0)}e^{-\frac{i}{\hbar}E_m(t'-t_0)} (\Psi_{m'}, H^{(P)}(t')\Psi_m) \\ &= (i\hbar)^{-1} e^{-\frac{i}{\hbar}E_{m'}(t-t_0)} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{mm'}(t'-t_0)} (\Psi_{m'}, H^{(P)}(t')\Psi_m) , \end{aligned} \quad (2.152)$$

où nous avons introduit la fréquence de Bohr relative à la transition $m \rightarrow m'$,

$$\omega_{m \rightarrow m'} \equiv \omega_{mm'} := (E_{m'} - E_m)/\hbar . \quad (2.153)$$

Au premier ordre, la probabilité de transition est donc

$$\mathcal{P}_{m \rightarrow m'}^{(1)}(t) = \hbar^{-2} \left| \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{mm'}(t'-t_0)} (\Psi_{m'}, H^{(P)}(t')\Psi_m) \right|^2 . \quad (2.154)$$

Si $H^{(P)} \neq 0$ est une constante intemporelle, cette expression implique la conservation de l'énergie, $\Delta t \cdot \Delta E \leq \hbar$.

2.3.2 Amplitudes de transition

Soit (Ψ_n) un système complet d'états propres de $H^{(0)}$ d'énergie E_n . Puisque nous considérons que l'hamiltonien $H^{(0)}$ ne dépend pas explicitement du temps, ces états propres sont des états stationnaires. Une solution générique pour l'hamiltonien $H^{(0)}$ est alors une superposition

$$\Psi(t) = \sum_n a_n(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} \Psi_n . \quad (2.155)$$

Les coefficients $a_n(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)}$ correspondent donc aux composantes de $\Psi(t)$ dans la base des Ψ_n , et les a_n sont des constantes qui dépendent des conditions initiales.

On introduit maintenant une perturbation de cet hamiltonien :

$$H(t) = H^{(0)} + H^{(P)}(t) . \quad (2.156)$$

Pour $|H^{(P)}|(t) \ll |H^{(0)}|$ en tout temps t , on s'attend à ce que les nouvelles solutions diffèrent peu de Eq. (2.155). Une solution générique pour $H(t)$ peut encore être développée mais, en général, les coefficients a_n vont désormais dépendre du temps (dans la représentation d'interaction) :

$$\Psi(t) = \sum_n a_n(t, t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} \Psi_n . \quad (2.157)$$

L'équation de Schrödinger $i\hbar \partial_t \Psi = H \Psi$ donne alors

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \left(\partial_t a_n - \frac{i}{\hbar} a_n E_n \right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} \Psi_n \\ = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} \left(H^{(0)} + H^{(P)} \right) \Psi_n . \end{aligned} \quad (2.158)$$

En utilisant que $H^{(0)} \Psi_n = E_n \Psi_n$, on obtient

$$i\hbar \sum_n (\partial_t a_n) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} \Psi_n = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} H^{(P)} \Psi_n . \quad (2.159)$$

En prenant le produit scalaire avec Ψ_k , on obtient une équation exacte

$$\boxed{\frac{da_k}{dt} = (i\hbar)^{-1} \sum_n a_n(t, t_0) \left(\Psi_k, H^{(P)}(t) \Psi_n \right) e^{i\omega_{nk}(t-t_0)}} \quad (2.160)$$

Elle représente, sous forme condensée, un système d'équations différentielles linéaires couplées. Le couplage entre a_k et les coefficients a_n provient uniquement de l'existence de la perturbation de l'hamiltonien, $H^{(P)}$. Malheureusement, on ne connaît pas de solution exacte dans le cas général.

Supposons que le système est dans l'état Ψ_m à l'instant initial t_0 . Ceci implique $a_k(t_0, t_0) = \delta_{km}$. Dans ce cas, nous pouvons écrire Eq. (2.160) sous forme intégrale,

$$a_k(t, t_0) = \delta_{km} + (i\hbar)^{-1} \sum_n \int_{t_0}^t dt' a_n(t', t_0) \left(\Psi_k, H^{(P)}(t') \Psi_n \right) e^{i\omega_{nk}(t'-t_0)} . \quad (2.161)$$

En itérant cette équation intégrale, nous pouvons de nouveau obtenir une série de puissance de $(i\hbar)^{-1}$. Les termes d'ordre successif sont alors

$$a_k^{(0)}(t, t_0) = \delta_{km} , \quad (2.162)$$

$$a_k^{(1)}(t, t_0) = (i\hbar)^{-1} \int_{t_0}^t dt' \left(\Psi_k, H^{(P)}(t') \Psi_m \right) e^{i\omega_{mk}(t'-t_0)} , \quad (2.163)$$

$$a_k^{(2)}(t, t_0) = (i\hbar)^{-2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \dots . \quad (2.164)$$

Ce développement du vecteur d'état dans la représentation de Schrödinger est le pendant de la série de Dyson, qui donne l'opérateur d'évolution dans la représentation intermédiaire.

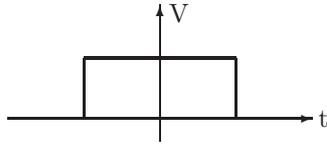
L'amplitude $a_k(t, t_0)$ est l'amplitude de transition de l'état m dans l'état k . La probabilité de transition est

$$\mathcal{P}_{m \rightarrow k}(t) = |a_k(t, t_0)|^2 . \quad (2.165)$$

Par inspection on trouve que cette expression est en accord ordre par ordre avec celle obtenu avec la série de Dyson.

2.3.3 Perturbations statiques

Nous considérons une perturbation de l'hamiltonien, $H^{(P)}(t) = V$, active sur une intervalle de temps $-T \leq t \leq T$. Pour $t \leq -T$, on suppose que le système est dans l'état propre $\Psi(t_0) = \Psi_m$.



Nous voulons calculer la probabilité que le système se trouve dans l'état propre $\Psi(T) = \Psi_n$ au temps T , i.e. $\mathcal{P}_{m \rightarrow n}(T) = |a_n(T)|^2$. Au premier ordre, la probabilité de transition par unité de temps vers l'état propre n est donnée par Eq. (2.154), i.e.,

$$\begin{aligned} W_{m \rightarrow n}^{(single)}(T) &:= \frac{1}{2T} \mathcal{P}_{m \rightarrow n}(T) \\ &= \frac{\hbar^{-2}}{2T} |(\Psi_n, V \Psi_m)|^2 \int_{-T}^T dt e^{i\omega_{mn}t} \int_{-T}^T dt' e^{-i\omega_{mn}t'} . \end{aligned} \quad (2.166)$$

En général, nous nous intéressons à des intervalles de temps T très long, i.e., on considère les états asymptotiques pour lesquels $T \gg \omega_{mn}^{-1}$. Dans la limite $T \rightarrow \infty$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T}^T dt e^{i\omega_{mn}t} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T dt' e^{-i\omega_{mn}t'} \\ = 2\pi\delta(\omega_{mn}) \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T dt' = 2\pi\delta(\omega_{mn}) \\ = 2\pi\delta\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar}\right) = 2\pi\hbar\delta(E_n - E_m) . \end{aligned} \quad (2.167)$$

Ceci nous permet d'écrire finalement

$$W_{m \rightarrow n}^{(single)}(T) = \frac{2\pi}{\hbar} |(\Psi_n, V(T)\Psi_m)|^2 \delta(E_n - E_m) . \quad (2.168)$$

La fonction δ exprime la conservation d'énergie d'une telle transition. Ainsi, dans le cas statique, pour avoir une transition, il faut soit des niveaux d'énergie dégénérés, soit une diffusion élastique. Il voulons encore prendre en compte le fait que tout détecteur possède une résolution finie. Dans le meilleur de cas, le détecteur ne peut mesurer que l'impulsion finale entre $\hbar k$ et $\hbar(k + dk)$. La situation est alors décrite par une *densité d'états finals*, $\rho(k)$, telle que

$$\rho(k)d^3k = \rho(k)k^2 dk d\Omega . \quad (2.169)$$

La densité des états finals qui conserve l'énergie est de la forme

$$\rho(E_n) = \rho(k)\delta(E_n - E_m) . \quad (2.170)$$

Au premier ordre, la probabilité de transition par unité de temps est alors donnée par la *règle d'or de Fermi* :

$$\boxed{W_{m \rightarrow n} = W_{m \rightarrow n}^{(single)} \rho(k) = \frac{2\pi}{\hbar} |(\Psi_n, V\Psi_m)|^2 \rho(E_n)} \quad (2.171)$$

En guise de conclusion, une perturbation constante ne peut induire de transition qu'entre des états propres d'énergie égale ; le système doit nécessairement avoir la même énergie (à $2\pi\hbar/T$ près) dans l'état initial et dans l'état final.

2.3.4 L'approximation adiabatique

La méthode de perturbation dérivée jusqu'ici n'est valable que dans le cas où $H(t) = H^{(0)} + H^{(P)}(t)$ et $|H^{(P)}(t)| \ll |H^{(0)}|$ pour tout t . Toutefois, il est aussi possible de dériver une méthode d'approximation qui est valable si $|\partial_t H^{(P)}(t)|$ est petit.

Pour ceci, nous considérons une équation de Schrödinger "instantanée",

$$H(t)\Psi_n(t) = E_n(t)\Psi_n(t) , \quad (2.172)$$

où les $(\Psi_n(t))_n$ forment une base orthonormée à tout moment t . Pour une solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps, $i\hbar\partial_t\Psi = H(t)\Psi$, nous posons

$$\Psi(t) = \sum_k a_k(t, t_0) \Psi_k(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' E_k(t')} . \quad (2.173)$$

Suivant notre hypothèse, les a_k et E_k varient lentement, et l'on a

$$(\Psi_m(t), \Psi_k(t)) = \delta_{km} . \quad (2.174)$$

L'équation de Schrödinger avec l'ansatz Eq. (2.173) donne alors

$$i\hbar \sum_k \left[\dot{a}_k \Psi_k + a_k \dot{\Psi}_k - \frac{i}{\hbar} E_k a_k \Psi_k \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' E_k(t')} \quad (2.175)$$

$$= \sum_k a_k H(t) \Psi_k e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' E_k(t')} , \quad (2.176)$$

où nous avons introduit la notation $\dot{\cdot} \equiv \partial_t = \frac{d}{dt}$. Ainsi, Eq. (2.172) implique

$$\sum_k \left[\dot{a}_k \Psi_k + a_k \dot{\Psi}_k \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' E_k(t')} = 0 . \quad (2.177)$$

Nous prenons le produit scalaire de ce vecteur avec $\Psi_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' E_m(t')}$. En introduisant la fréquence de Bohr "instantanée",

$$\omega_{km}(t) := [E_m(t) - E_k(t)] / \hbar , \quad (2.178)$$

nous obtenons

$$\dot{a}_m = - \sum_k a_k \left(\Psi_m, \dot{\Psi}_k \right) e^{i \int_{t_0}^t dt' \omega_{km}(t')} \quad (2.179)$$

Pour évaluer l'expression (2.179), nous avons besoin de calculer $(\Psi_m, \dot{\Psi}_k)$. En différentiant Eq. (2.172) par rapport au temps, nous obtenons

$$\dot{H} \Psi_k + H \dot{\Psi}_k = \dot{E}_k \Psi_k + E_k \dot{\Psi}_k . \quad (2.180)$$

Le produit scalaire de cette équation avec Ψ_m donne

$$\left(\Psi_m, \dot{H} \Psi_k \right) + E_m \left(\Psi_m, \dot{\Psi}_k \right) = \dot{E}_k \left(\Psi_m, \Psi_k \right) + E_k \left(\Psi_m, \dot{\Psi}_k \right) . \quad (2.181)$$

Pour $m \neq k$, nous avons donc

$$\left(\Psi_m, \dot{\Psi}_k \right) (E_k - E_m) = \left(\Psi_m, \dot{H} \Psi_k \right) , \quad (2.182)$$

et, si $E_k \neq E_m$, nous obtenons

$$\left(\Psi_m, \dot{\Psi}_k \right) = \frac{-1}{\hbar \omega_{km}} \left(\Psi_m, \dot{H} \Psi_k \right) . \quad (2.183)$$

Pour déterminer $(\Psi_m, \dot{\Psi}_m)$, nous utilisons que $(\Psi_m, \Psi_m) = 1$, ce qui implique $(\Psi_m, \dot{\Psi}_m) + (\dot{\Psi}_m, \Psi_m) = 0$, ou $(\Psi_m, \dot{\Psi}_m) + (\Psi_m, \dot{\Psi}_m) = 0$. On peut donc poser $(\Psi_m, \dot{\Psi}_m) = i\alpha$, où $\alpha(t)$ est une fonction réelle. Maintenant, nous modifions Ψ_m par une phase qui dépend du temps

$$\Psi'_m(t) = \Psi_m(t) e^{i\gamma(t)} , \quad (2.184)$$

ce qui nous permet d'écrire

$$\left(\Psi'_m, \dot{\Psi}'_m \right) = \left(\Psi_m, \dot{\Psi}_m \right) + i\dot{\gamma} = i(\alpha + \dot{\gamma}) . \quad (2.185)$$

Choisisant $\gamma(t) = -\int_{t_0}^t dt' \alpha(t')$, nous obtenons

$$\left(\Psi'_m, \dot{\Psi}'_m\right) = 0. \quad (2.186)$$

Le choix de la phase $\gamma(t)$, donc de Ψ'_m , est toujours possible. Toutefois, il existe des situations pour lesquelles l'hamiltonien est périodique, i.e., $H(t+T) = H(t)$, sans que ce soit le cas pour la fonction d'onde, $\Psi'_m(t+T) \neq \Psi'_m(t)$. Ceci mène à des conséquences physiques intéressantes (phase de Berry, voir exercice).

Pour alléger la notation, nous omettons désormais le "prime", et posons

$$\left(\Psi_m, \dot{\Psi}_m\right) = 0. \quad (2.187)$$

En combinant les équations (2.179) et (2.183), nous obtenons

$$\dot{a}_m = \sum_{k \neq m} \frac{a_k}{\hbar \omega_{km}} \left(\Psi_m, \dot{H} \Psi_k\right) e^{i \int_{t_0}^t dt' \omega_{km}(t')}. \quad (2.188)$$

Si nous supposons que le système initial est dans l'état Ψ_n , i.e., $a_k(t_0, t_0) = \delta_{kn}$, nous avons, au premier ordre,

$$\dot{a}_m^{(1)} = \frac{1}{\hbar \omega_{nm}} \left(\Psi_m, \dot{H} \Psi_n\right) e^{i \int_{t_0}^t dt' \omega_{nm}(t')} \quad m \neq n. \quad (2.189)$$

C'est ici que nous faisons intervenir la variation lente de l'hamiltonien. Comme $H(t) = H^{(0)} + H^{(P)}(t)$ et $\omega_{km}(t)$ varient lentement, il en est de même pour les coefficients a_k . En intégrant Eq. (2.189) pour $m \neq n$, nous pouvons donc négliger la dépendance temporelle de $H^{(P)}$, ω_{nm} et Ψ_m , ce qui donne (nous posons $t_0 = 0$)

$$a_m^{(1)} = \frac{1}{i \hbar \omega_{nm}^2} \left(\Psi_m, H^{(P)}(t) \Psi_n\right) [e^{it \omega_{nm}} - 1] \quad m \neq n. \quad (2.190)$$

Il est intéressant de noter que $a_m^{(1)}$ n'est pas une fonction croissante, mais oscillante. En fait, pour la probabilité de transition entre les états n et m , on obtient, au premier ordre pour $m \neq n$,

$$\mathcal{P}_{n \rightarrow m}^{(1)}(t) = \left|a_m^{(1)}\right|^2 = 4 \sin^2\left(\frac{\omega_{nm} t}{2}\right) \left|\frac{\hbar}{(E_m - E_n)^2} \left(\Psi_m, H^{(P)}(t) \Psi_n\right)\right|^2. \quad (2.191)$$

Cette approximation adiabatique n'est valable que si $\left|H^{(P)}/H^{(0)}\right| \ll |\omega_{nm}|$.

2.3.5 Autres méthodes d'approximation

La méthode de Rayleigh-Ritz

Cette méthode est très utile pour trouver l'énergie de l'état fondamental d'un système.

Proposition 2.3.1 *Désignons par H l'hamiltonien d'un système quantique et par*

$$E(\varphi) = \frac{(\varphi, H \varphi)}{(\varphi, \varphi)} \quad (2.192)$$

la valeur moyenne de l'énergie dans l'état φ . $E(\varphi)$ est minimisé pour l'état fondamental.

Preuve : (pour un spectre discret)

Nous considérons un hamiltonien à spectre purement discret, de valeurs propres $(E_n)_{n=0}^{\infty}$ et vecteurs propres Ψ_n . Dans ce cas, les vecteurs propres peuvent être choisis tels que $(\Psi_n)_{n=0}^{\infty}$ forment une base orthonormée de l'espace d'Hilbert \mathcal{H} . Donc, un état φ quelconque peut être décomposé suivant $\varphi = \sum_n a_n \Psi_n$. Nous choisissons φ normalisé, i.e., $(\varphi, \varphi) = \sum |a_n|^2 = 1$. De plus, nous ordonnons la base (Ψ_n) de telle manière que E_0 représente la valeur propre minimale, $E_n \geq E_0 \forall n$. Ainsi, on a

$$E(\varphi) = (\varphi, H\varphi) = \sum_n E_n |a_n|^2 \geq E_0 . \quad (2.193)$$

L'égalité est vérifiée si, et seulement si, les a_n sont non-nuls seulement pour l'énergie $E_n = E_0$, donc φ est un élément de "l'espace fondamental". Si celui-ci n'est pas dégénéré, on a $\varphi = a_0 \Psi_0$, et $|a_0|^2 = 1$. ■

Proposition 2.3.2 *Soit $E(\varphi)$ comme dans la proposition précédente. Tout φ pour lequel $E(\varphi)$ est stationnaire est un vecteur propre avec valeur propre $E(\varphi)$.*

Preuve :

On considère la variation de l'équation $E(\varphi) (\varphi, \varphi) = (\varphi, H\varphi)$. On a

$$\delta E(\varphi, \varphi) + E(\delta\varphi, \varphi) + E(\varphi, \delta\varphi) = (\delta\varphi, H\varphi) + (\varphi, H\delta\varphi) . \quad (2.194)$$

Si $E(\varphi)$ est stationnaire, on a $\delta E = 0$ et il vient

$$(\varphi, (E - H)\delta\varphi) + (\delta\varphi, (E - H)\varphi) = 0 \quad \forall \delta\varphi . \quad (2.195)$$

Si nous posons $\delta\varphi' = i\delta\varphi$, ceci implique alors

$$i(\varphi, (E - H)\delta\varphi) - i(\delta\varphi, (E - H)\varphi) = 0 . \quad (2.196)$$

La combinaison (2.195) + i · (2.196) donne ainsi $(\delta\varphi, (E - H)\varphi) = 0$ et, puisque $\delta\varphi$ est arbitraire, on a $(E - H)\varphi = 0$ ou $H\varphi = E\varphi$. ■

Pour illustrer ce procédé, nous considérons l'atome d'hélium. Son hamiltonien est donné dans l'éq. (2.29), i.e.,

$$H = \sum_{i=1}^Z \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i < j}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} . \quad (2.197)$$

Pour $Z = 2$, il s'avère que cet hamiltonien est déjà trop compliqué pour qu'il soit possible de résoudre exactement son équation aux valeurs propres. La difficulté provient du terme d'interaction mutuelle des électrons.

En l'absence d'interaction, les électrons sont indépendants, et nous avons vu (cf. § 2.2.1) que l'état fondamental des deux électrons dans le potentiel d'un noyau à charge $Z = 2$ est donné par

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{8}{\pi a_0^3} e^{-2(r_1+r_2)/a_0} , \quad (2.198)$$

où a_0 est le rayon de Bohr.

Nous supposons maintenant que la répulsion mutuelle des électrons a comme effet que la charge électrique effective perçue par les électrons est un peu inférieure à 2. Nous remplaçons alors Eq. (2.198) par

$$\Psi_z(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a_0} . \quad (2.199)$$

C'est la fonction d'onde d'un état fondamental de deux électrons indépendants autour d'un noyau de charge Z . Le préfacteur Z^3 assure que $\|\Psi_z\|^2 = 1$. La valeur d'expectation donne

$$E(\Psi_z) = (\Psi_z, H\Psi_z) = \frac{e^2}{a_0} Z \left(Z - \frac{27}{8} \right) \quad (2.200)$$

(pour les intégrales, voir théorie des perturbations stationnaires, faire attention de mettre $Z = 2$ dans l'hamiltonien mais laisser Z libre dans la fonction d'onde). L'extrémalisation par rapport à Z de cette égalité, $\partial_z E = 0$, implique $Z = \frac{27}{16} = Z_0$. L'approximation pour l'énergie de l'état fondamental est alors

$$E_0 \leq E(\Psi_{z_0}) = -76.6\text{eV} . \quad (2.201)$$

Ce résultat est en meilleur accord avec la valeur expérimentale (-78.6eV) que le résultat obtenu par le calcul perturbatif (-75eV). Comme prévu d'après la première proposition, les deux valeurs sont trop élevées.

Ce simple principe variationnel de Rayleigh-Ritz a beaucoup d'applications, surtout en physique moléculaire (liaisons chimiques, voir e.g. [12] Chap. XI, Complément G).

Il est évident que le choix de la fonction d'essai et de ses paramètres revêt la plus grande importance, et c'est ici que l'intuition physique est nécessaire pour résoudre le problème. Le désavantage de cette méthode est qu'il n'y a pas de procédure systématique pour estimer l'erreur de l'approximation.

L'approximation Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)

La même approximation qui mène de l'électrodynamique dans les milieux à l'optique des raies, mène aussi de la mécanique quantique à la mécanique classique. C'est la limite dans laquelle la longueur d'onde des particules (des ondes électromagnétiques) est beaucoup plus petite que l'extension typique L sur laquelle varie le potentiel (les propriétés du milieu). En mécanique quantique, la longueur d'onde est donnée par

$$\lambda = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V)}} . \quad (2.202)$$

Elle doit être beaucoup plus petite que $L \simeq |V/\partial_x V|$, i.e.,

$$\left| \frac{\hbar \partial_x V}{V \sqrt{2m(E-V)}} \right| \simeq \frac{\lambda}{L} \ll 1 . \quad (2.203)$$

Dans la limite $\hbar \rightarrow 0$, on retombe sur la mécanique classique.

Soit $H(t, \mathbf{x}, \mathbf{p})$ l'hamiltonien classique d'un système,

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(t, \mathbf{x}) . \quad (2.204)$$

Alors, l'opérateur hamiltonien de la mécanique quantique est $H(t, \mathbf{x}, \frac{\hbar}{i}\nabla)$. Explicitement, l'analogie quantique de Eq. (2.204) est

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \Delta + V(t, \mathbf{x}) . \quad (2.205)$$

Pour la fonction d'onde d'une particule, nous faisons l'ansatz

$$\Psi(t, \mathbf{x}) = e^{\frac{i}{\hbar}S(t, \mathbf{x})} , \quad (2.206)$$

et développons $S(t, \mathbf{x})$ en une série de puissance en \hbar/i ,

$$S = S^{(0)} + \frac{\hbar}{i}S^{(1)} + \dots . \quad (2.207)$$

Ceci nous permet de considérer séparément les contributions d'ordre successif à l'équation de Schrödinger $i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi$.

Ordre \hbar^0 (approximation classique) :

L'équation de Schrödinger donne

$$\left(\partial_t S^{(0)} \right) \Psi + \left[\frac{(\nabla S^{(0)})^2}{2m} + V \right] \Psi = 0 . \quad (2.208)$$

c'est-à-dire,

$$\partial_t S^{(0)} + H(t, \mathbf{x}, \nabla S^{(0)}) = 0 . \quad (2.209)$$

Mais ceci n'est rien d'autre que l'équation de Hamilton-Jacobi de la mécanique classique! En effet, on a

$$\mathbf{p} := \nabla S^{(0)} , \quad \mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{m} \nabla S^{(0)} , \quad (2.210)$$

$$\text{où } S^{(0)} = \int^t dt' \left(\frac{\mathbf{p}^2(t')}{2m} - V(t', \mathbf{x}) \right) . \quad (2.211)$$

Ordre \hbar (approximation semi-classique) :

Pour notre exemple et au premier ordre, nous obtenons

$$\partial_t S^{(1)} + \frac{1}{m} \left(\nabla S^{(0)} \cdot \nabla S^{(1)} \right) + \frac{1}{2m} \Delta S^{(0)} = 0 . \quad (2.212)$$

Pour une solution $S^{(0)}(t, \mathbf{x}(t))$ de l'équation de Hamilton-Jacobi (2.209) donnée par Eq. (2.210)–(2.211), on peut alors montrer (comme en mécanique classique) que $\mathbf{x}(t)$ et $\mathbf{p}(t) = \nabla S^{(0)}$ satisfont aux équations canoniques

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \quad \text{et} \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} . \quad (2.213)$$

Si on pose encore

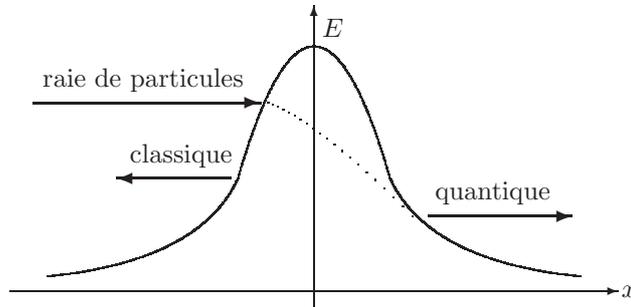
$$\rho := e^{2S^{(1)}} , \quad \mathbf{J} := \rho \mathbf{v} = \frac{1}{m} e^{2S^{(1)}} \nabla S^{(0)} , \quad (2.214)$$

l'équation (2.212) implique une équation de continuité,

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 . \quad (2.215)$$

De plus, Eq. (2.212) implique également que, pour $S^{(0)}$ réel, $S^{(1)}$ est aussi réel, donc $\rho > 0$. A noter que $S^{(0)}$ réel est nécessaire pour que Eq. (2.209) admette une solution en mécanique classique.

Si, à un instant donné, la normalisation est $\int d^3x \rho(\mathbf{x}) = 1$, l'équation de continuité (2.215) assure que ceci restera valable à tout temps. Pour une fonction d'onde $\Psi \simeq \exp\left(\frac{i}{\hbar}S^{(0)} + S^{(1)}\right)$, on a $\rho = e^{2S^{(1)}} = |\Psi|^2$. Ceci soutient l'interprétation de $|\Psi|^2$ comme densité de probabilité. La détermination de $S^{(1)}$ est souvent utilisée pour calculer la probabilité de l'effet tunnel, par exemple, dans la situation esquissée ci-dessous :

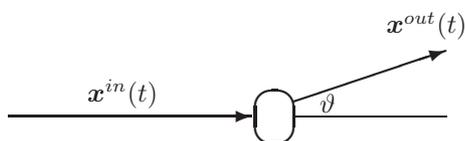


Chapitre 3

Théorie de la diffusion

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la situation suivante : une particule libre entre en interaction avec un potentiel localisé (ou d'autres particules localisées). Nous supposons connu l'état initial de la particule, et voulons déterminer l'état de la particule après la "collision". Parmi toutes les réactions possibles, on désigne sous le nom de *diffusion* celles dans lesquelles l'état final est constitué des mêmes particules que l'état initial. Par simplicité, nous nous limiterons à l'étude de la *diffusion élastique*, pour laquelle l'énergie ne change pas lors de la collision.

En physique classique, l'état de la particule incidente (qui est libre) est entièrement déterminée par son impulsion. Il en est de même pour la particule sortante :



Dans ce chapitre, nous nous intéressons à des processus se produisant au niveau quantique. Il n'est alors pas possible en général de prévoir avec certitude quel état final va résulter d'une collision donnée ; on cherche donc seulement à prédire les *probabilités* pour un certain "état" final. Pour cela, nous allons étudier l'évolution de la fonction d'onde associée aux particules incidentes sous l'influence des interactions avec les particules de la cible.

La diffusion d'un faisceau de particules par une cible est un problème complexe. Pour aller à l'essentiel, nous faisons les hypothèses simplificatrices suivantes :

- * Les particules du faisceau incident et de la cible sont supposées sans spin.
- * Nous considérons des diffusions élastiques, i.e., nous négligeons l'éventuelle structure interne des particules impliquées dans la diffusion.
- * Nous supposons la "cible" suffisamment mince pour pouvoir négliger la diffusion multiple.
- * Nous considérons le processus élémentaire de diffusion, i.e., nous nous restreignons à la diffusion d'une particule du faisceau incident par une particule de la "cible", et négligeons toute cohérence entre les ondes diffusées.

3.1 Diffusion stationnaire par un potentiel

Tout d'abord, nous traitons le problème de façon simple et intuitive. Pour décrire quantitativement le processus de diffusion d'une particule incidente par un potentiel, nous allons focaliser notre attention sur les états stationnaires du problème. Ce faisant, nous considérerons un état stationnaire comme représentant un fluide de probabilité en régime d'écoulement permanent, et nous étudierons la structure des courants de probabilité correspondants. Bien entendu, ce raisonnement simplifié n'est pas rigoureux, mais il capture l'essentiel du problème.

Nous considérons la diffusion d'une particule de masse m par un potentiel statique, $V(\mathbf{x})$, qui décroît rapidement ($r^2 V(\mathbf{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$ dans toutes les directions¹). L'équation de Schrödinger décrivant l'évolution de la particule admet des solutions d'énergie E bien définie, i.e., des états stationnaires,

$$\Psi_{\mathbf{k}}(t, \mathbf{x}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) e^{-iEt/\hbar}, \quad E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad (3.1)$$

où E et \mathbf{p} dénotent, respectivement, l'énergie et l'impulsion de la particule incidente avant qu'elle n'ait pénétré la zone d'action du potentiel. La fonction d'onde spatiale $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ est solution de l'équation aux valeurs propres

$$(\Delta + k^2) \psi_{\mathbf{k}} = U \psi_{\mathbf{k}}, \quad U = 2m\hbar^{-2}V. \quad (3.2)$$

Pour chaque valeur de k (i.e., d'énergie E), cette équation admet une infinité de solutions (les valeurs propres de l'hamiltonien sont infiniment dégénérées). Il nous faut donc encore préciser quelles sont les solutions admises par notre problème en spécifiant les états asymptotiques.

Loin de la zone d'action du potentiel, la particule incidente est considérée libre; elle peut donc être représentée par une onde plane, $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ (état non-normalisable). La présence du potentiel scinde l'onde incidente en une onde transmise et une onde diffusée. Par conséquent, la fonction d'onde représentant l'état stationnaire de diffusion associé à une énergie E doit être une superposition d'une onde plane et d'une onde diffusée (qui dépend du potentiel). La forme asymptotique après la "collision" (i.e., à grande distance du potentiel localisé) est simple :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}}}{r}, \quad \mathbf{k}' \equiv k\hat{\mathbf{x}}. \quad (3.3)$$

Cette forme asymptotique sera dérivée ultérieurement (cf. § 3.1.2). Pour l'instant, nous nous contenterons d'une explication "intuitive" :

- Les deux termes du membre de droite de l'équation (3.3) sont des solutions de $(\Delta + k^2)\psi_{\mathbf{k}} = 0$. Le premier terme, $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$, est l'onde incidente. Le deuxième terme, $f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}}}{r}$ représente l'onde diffusée.²
- En général la diffusion n'étant pas isotrope, l'amplitude de l'onde sortante dépend de la direction (ϑ, φ) que l'on considère. Ceci motive l'introduction de l'amplitude de diffusion, $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$, où $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{x}}$ est le vecteur d'onde émergent de la diffusion. La fonction $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ contient évidemment toute l'information relative au potentiel $V(\mathbf{x})$.

¹Cette hypothèse exclut le potentiel coulombien; celui-ci nécessite un traitement particulier (cf. § 3.2.2).

²Comme en optique, le facteur $1/r$ assure que le flux total d'énergie à travers une sphère de rayon r est indépendant de r pour r grand. En mécanique quantique, c'est le flux de probabilité à travers cette sphère qui ne dépend pas de r .

3.1.1 La section efficace

Nous considérons un courant incident J_i de particules mono-énergétiques sur une cible; J_i représente donc le nombre de particules par unité de temps et par unité de surface normale à la direction d'incidence. Nous supposons que ce courant est suffisamment dilué pour que l'on puisse négliger l'interaction mutuelle des particules.

Avec un compteur disposé loin de la cible, on mesure le nombre dn de particules diffusées par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega$ suivant la direction (ϑ, φ) . Le nombre dn est bien sûr proportionnel au flux incident J_i et à $d\Omega$.

Nous supposons aussi que la cible consiste d'un grand nombre N de particules suffisamment distantes l'une de l'autre pour que l'on puisse les considérer comme centres de diffusion indépendants. Par ailleurs, la cible doit être assez mince pour que l'on puisse négliger toute diffusion multiple. Dans ce cas, dn est aussi proportionnel à N .

En toute généralité, on a alors

$$dn(\Omega) = J_i N \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega, \quad (3.4)$$

où $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta, \varphi)$ est la *section efficace différentielle de diffusion* dans la direction (ϑ, φ) . Son intégrale sur les directions représente la section efficace totale de diffusion,

$$\sigma = \int_{\mathbb{S}^2} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (3.5)$$

La section efficace totale a la dimension d'une surface et elle est souvent mesurée en "barn", $1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$ (e.g., $\sigma_T = 6.65 \times 10^{-25} \text{ cm}^2$ est la section efficace de la diffusion Thomson de l'électrodynamique classique).

D'après Eq. (3.4), il est possible de calculer la section efficace à partir du courant incident et du courant diffusé. Pour une fonction d'onde $\psi(\mathbf{x})$, la densité de courant de probabilité est donnée par Eq. (1.159) avec $\mathbf{A} = 0$, i.e.,

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{2im} \left[\psi^*(\mathbf{x}) \nabla \psi(\mathbf{x}) - (\nabla \psi^*(\mathbf{x})) \psi(\mathbf{x}) \right], \quad \rho(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|^2. \quad (3.6)$$

Le courant incident $\mathbf{J}_i(\mathbf{x})$ s'obtient en remplaçant la fonction d'onde $\psi(\mathbf{x})$ par l'onde plane $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$. C'est une onde de densité $\rho = 1$ avec courant

$$\mathbf{J}_i = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} = \frac{\mathbf{p}}{m}. \quad (3.7)$$

L'onde diffusée (3.3) étant exprimée en coordonnées sphériques, nous obtenons

$$\mathbf{J}_d = \frac{\hbar \mathbf{k}'}{mr^2} |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 + \mathcal{O}(1/r^3). \quad (3.8)$$

Pour r grand, l'onde diffusée est donc pratiquement radiale, et porte une densité de courant de probabilité; $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{x}}$ est le vecteur d'onde émergent de la diffusion.

Comme \mathbf{J}_d exprime la densité de particules diffusées suivant la direction (ϑ, φ) par unité de surface, et $dS = r^2 d\Omega$, nous avons $dn = N |\mathbf{J}_d| r^2 d\Omega$. Ceci implique que dn est indépendant de r pour autant que r soit suffisamment grand.

En reportant ces résultats dans Eq. (3.4), nous obtenons une expression pour la section efficace différentielle :

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(|\mathbf{J}_d| r^2)_{r \rightarrow \infty}}{|\mathbf{J}_i|} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2} \quad (3.9)$$

La section efficace différentielle est donc simplement donnée par le carré du module de l'amplitude de diffusion.

Dans la direction vers l'avant, le faisceau subit une atténuation liée à la diffusion des particules dans toutes les autres directions de l'espace. Dans le calcul du flux ceci se montre comme une interférence négative entre l'onde incidente, $\psi_i = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ et l'onde diffusé, $\psi_d = f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r}$. Pour faire le calcul correct il faut travailler avec un paquet d'onde pour l'onde incidente, mais on obtient une bonne idée de ce qui se passe en calculant la partie $1/r^2$ du courant d'interférence,

$$\mathbf{J}_{int} = \frac{\hbar}{2im} \left[\psi_i^* \nabla \psi_d + \psi_d^* \nabla \psi_i - (\nabla \psi_i^*) \psi_d - (\nabla \psi_d^*) \psi_i \right].$$

Ce courant \mathbf{J}_{int} a une partie $\propto 1/r$ qui est non-physique et dont le flux ne contribue pas, mais aussi une partie $\propto 1/r^2$ qui vient de la dérivée du facteur $1/r$ dans ψ_d , et qui contribue au flux à travers une surface $dS = r^2 d\Omega$ lointaine. Ceci est le courant d'interférence physique. Un petit calcul donne

$$\mathbf{J}_{int,phys} = \frac{\hbar}{2imr^2} \left[f^* e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-kr)} - f e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-kr)} \right].$$

Dans toutes les directions sauf en avant, $\mathbf{k} \parallel \mathbf{x}$, le flux à travers une surface $dS = r^2 d\Omega$ oscille et le flux moyen disparaît. Seule vers l'avant on obtient un flux net,

$$\langle \mathbf{J}_{int,phys} r^2 \rangle = -\frac{\hbar}{m} \text{Im}(f)(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \hat{\mathbf{k}}.$$

Ceci correspond à une nette atténuation du flux si $\text{Im}(f)(\mathbf{k}, \mathbf{k}) > 0$. Nous allons voir par la suite que cette condition est toujours satisfaite, et que $\text{Im}(f)(\mathbf{k}, \mathbf{k})$ est lié à la section efficace totale (théorème optique).

3.1.2 Etats stationnaires de diffusion

Nous voulons maintenant démontrer explicitement l'existence de fonctions d'onde stationnaires ayant un comportement asymptotique de la forme (3.3). Pour cela, nous considérons une équation intégrale pour la fonction d'onde $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$, solution de (3.2) avec comportement asymptotique (3.3). Nous utilisons l'identité³

$$(\Delta + k^2) \frac{e^{ikr}}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{x}). \quad (3.10)$$

La fonction de Green de l'opérateur de Helmholtz $(\Delta + k^2)$, est alors donnée par

$$G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \quad (3.11)$$

³Considérée comme distribution au sens de Schwartz, e^{ikr}/r est dérivable à tous les ordres. Pour calculer son Laplacien, on se sert de l'identité $\Delta(1/r) = -4\pi\delta(\mathbf{x})$ (cf. [14], fonction de Green).

et

$$(\Delta + k^2) G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') . \quad (3.12)$$

Alors, toute fonction d'onde $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ telle que

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{x}) + \int d^3 x' G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}') U(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}') . \quad (3.13)$$

où $\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ est la fonction d'onde incidente, satisfait automatiquement l'équation de Schrödinger (3.2).

Nous devons encore vérifier que la solution (3.13) tend vers une onde libre asymptotiquement. On peut montrer que les conditions de bord sont satisfaites si $U \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^3)$. Formellement, les comportements asymptotiques ($\mathbf{x} \gg \mathbf{x}'$) peuvent être obtenus avec les développements

$$|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \stackrel{r \rightarrow \infty}{\simeq} r - \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}'}{r} + \mathcal{O}\left(\frac{r'^2}{r}\right) , \quad (3.14)$$

$$\frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} + \mathcal{O}\left(\frac{r'}{r^2}\right) , \quad (3.15)$$

où $\mathbf{k}' = k\mathbf{x}/r = k\hat{\mathbf{x}}$ est le vecteur d'onde émergent de la diffusion. Ceci nous permet d'écrire la fonction d'onde sous la forme d'une *équation intégrale de diffusion* :

$$\boxed{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\simeq} \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{x}) + \frac{e^{ikr}}{r} \left[-\frac{1}{4\pi} \int d^3 x' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \right]} \quad (3.16)$$

Les solutions de l'équation intégrale de la diffusion sont donc bien des états stationnaires de diffusion. En comparant avec la forme asymptotique (3.3), nous obtenons alors une *équation intégrale pour l'amplitude de diffusion* :

$$\boxed{f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 x' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}')} \quad (3.17)$$

Notons encore que ces manipulations peuvent être répétées en substituant à la fonction de Green sa complexe conjuguée, $\bar{G}_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$. Celle-ci est aussi une fonction de Green de la particule libre, mais elle correspond à un comportement asymptotique d'onde entrante. On obtient alors l'équation intégrale

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\simeq} \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{x}) + \frac{e^{-ikr}}{r} \left[-\frac{1}{4\pi} \int d^3 x' e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \right] . \quad (3.18)$$

Approximation de Born (1926)

L'approximation de Born consiste à remplacer $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ dans l'équation intégrale pour l'amplitude de diffusion (3.17) par l'onde incidente, $\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$:

$$f_B(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 x' e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') . \quad (3.19)$$

C'est une approximation au premier ordre. La section efficace est ainsi reliée à la transformée de Fourier du potentiel. Par itérations successives, on obtient

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{x}) = \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{x}) + \frac{e^{ikr}}{r} f_B(\mathbf{k}', \mathbf{k}) , \quad (3.20)$$

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3x' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{x}') , \quad (3.21)$$

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(2)}(\mathbf{x}) = \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{x}) + \frac{e^{ikr}}{r} f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) , \quad (3.22)$$

$$f^{(2)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \dots . \quad (3.23)$$

De proche en proche, on construit ainsi la *série de Born* de l'amplitude de diffusion. On procède de même pour la fonction d'onde stationnaire de diffusion : on pose

$$G_0(U)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) := -\frac{1}{4\pi} \int d^3x' G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}') U(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}') , \quad (3.24)$$

et la série de Born s'écrit

$$\psi_{\mathbf{k}} = \psi_{\mathbf{k}}^{(0)} + G_0(U)\psi_{\mathbf{k}}^{(0)} + G_0(U) \left[G_0(U)\psi_{\mathbf{k}}^{(0)} \right] + \dots . \quad (3.25)$$

Chaque terme du développement fait intervenir le potentiel une fois de plus que le terme précédent. Si $U (= 2m\hbar^{-2}V)$ décroît suffisamment vite, cette série converge absolument.

3.2 Applications

3.2.1 La diffusion d'un électron par un atome neutre

Comme première application, nous considérons la diffusion élastique d'une particule chargée (un électron) par un atome neutre. Pour simplifier le traitement, nous supposons que l'atome peut être traité comme une distribution de charges électriques. Nous supposons aussi que l'énergie de l'électron est suffisamment élevée pour que l'on puisse utiliser l'approximation de Born et négliger les "effets d'échange" (antisymétrisation). Ceci nous ramène donc à considérer la diffusion de l'électron par un potentiel électrique statique ϕ .

Nous désignons par $\rho(r)$ la distribution des électrons et par $Z = \int d^3x \rho(r)$ le nombre atomique de notre atome neutre. Le potentiel électrique ϕ est solution de l'équation de Poisson

$$\Delta\phi = -4\pi e [Z\delta(\mathbf{x}) - \rho(r)] . \quad (3.26)$$

Le potentiel auquel est soumis l'électron est alors $V(r) = e\phi(r)$. En considérant la transformation de Fourier, nous obtenons

$$q^2 \tilde{V}(q) = 4\pi e^2 [Z - F(q)] , \quad (3.27)$$

$$F(q) := \int d^3x e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \rho(r) = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr r \sin(qr) \rho(r) . \quad (3.28)$$

$F(q)$ est le "facteur de forme" de la distribution de charge de la couche électronique de l'atome, $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ est le vecteur d'onde transféré et q son module. Le

changement d'impulsion de l'électron est donc $\hbar\mathbf{q}$. L'équation (3.19) implique alors

$$f_B(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{2m_e e^2}{(\hbar q)^2} [Z - F(q)] . \quad (3.29)$$

Quant à la section efficace différentielle, elle est donnée par

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_B(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 = \frac{4m_e^2 e^4}{(\hbar q)^4} [Z - F(q)]^2 . \quad (3.30)$$

Soit encore a le rayon de l'atome, i.e., la distance moyenne des électrons au noyau. Si la distribution des électrons est simplement donnée par

$$\rho(r) = \frac{Z e^{-r/a}}{8\pi a^3} , \quad (3.31)$$

le facteur de forme devient

$$F(q) = \frac{Z}{(1 + q^2 a^2)^2} . \quad (3.32)$$

Soit ϑ l'angle de diffusion entre \mathbf{k} et \mathbf{k}' . La condition de grand angle de diffusion, $1 \ll qa = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|a = ak[2 - 2\cos(\vartheta)]^{1/2} = 2ak|\sin(\vartheta/2)|$ est alors équivalente à $|\sin(\vartheta/2)| \gg 1/(2ak)$. Dans cette limite de grand angle, nous pouvons négliger le facteur de forme $F(q)$, i.e., négliger l'effet des électrons, et nous obtenons la *formule de Rutherford* pour la diffusion du noyau "nu",

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_R = \frac{4m_e^2 e^4 Z^2}{(\hbar q)^4} = \frac{1}{\sin^4(\vartheta/2)^4} \left(\frac{e^2 Z}{2m_e v^2} \right)^2 \quad (3.33)$$

Pour la dernière égalité, nous avons utilisé $q = 2k|\sin(\vartheta/2)|$ et $\hbar k = p = m_e v$.

Dans la limite des petits angles, $qa \ll 1$, ou de basse énergie, $ka \ll 1$, le facteur de forme se réduit à $F(q) \simeq Z [1 - 2(qa)^2]$. L'effet d'écran des électrons est alors important.

D'autre part, pour des énergies très élevées, le noyau ne peut plus être considéré comme un point, et il faut aussi prendre en compte la distribution de charge du noyau, $F_N(q)$. La section efficace différentielle (3.33) devient alors

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m_e^2 e^4}{(\hbar q)^4} |F_N(q)|^2 \quad \text{avec} \quad F_N(0) = Z . \quad (3.34)$$

Validité de l'approximation de Born

La portée du potentiel est de l'ordre du rayon de l'atome, a . Une estimation basée sur le modèle de Thomas-Fermi donne $a \simeq Z^{-1/3} \hbar^2 / (m_e e^2)$. Si nous prenons comme valeur moyenne du potentiel la valeur au point $r = a$ de l'interaction coulombienne due au noyau, $V_0 \simeq Ze^2/a$, nous obtenons $ak = Z^{2/3} \gamma^{-1}$, où nous avons utilisé $v_e = \hbar k / m_e$ et $\gamma = Ze^2 / (\hbar v_e)$. L'approximation de Born n'est donc justifiée que pour des énergies suffisamment élevées de l'électron incident, $ka \gg 1$, i.e., $\gamma \ll 1$.

A l'aide d'expériences portant sur des collisions entre des électrons à haute énergie et des atomes, on peut alors étudier la distribution de charge du noyau (En pratique, il faut encore prendre en compte les corrections relativistes.).

3.2.2 Le potentiel de Yukawa

Comme deuxième exemple de l'approximation de Born, nous considérons le potentiel de Yukawa (ou potentiel de Coulomb avec "écran"),

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{r}, \quad (3.35)$$

où $V_0, \mu \in \mathbb{R}$ et $\mu > 0$. Nous supposons que $|V_0|$ est suffisamment petit pour que l'approximation de Born fasse du sens. Dans ce cas, l'amplitude de diffusion peut être déterminée d'après Eq. (3.19), i.e.,

$$f_B(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2mV_0}{\hbar^2} \int d^3x' e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} \frac{e^{-\mu r'}}{r'}, \quad (3.36)$$

où $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ est le vecteur d'onde transféré de module $q = 2k |\sin(\vartheta/2)|$, k étant le module du vecteur d'onde incident et ϑ l'angle de diffusion. Cette expression fait intervenir la transformée de Fourier du potentiel de Yukawa. Comme ce potentiel ne dépend que de la coordonnée radiale, on peut aisément intégrer sur les angles comme dans (3.28), ce qui donne

$$f_B(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr' r' \sin(qr') \frac{e^{-\mu r'}}{r'} = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{1}{q^2 + \mu^2}. \quad (3.37)$$

La section efficace différentielle est alors

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2 V_0^2}{\hbar^4} \frac{1}{[4k^2 \sin^2(\vartheta/2) + \mu^2]^2}. \quad (3.38)$$

Comme on pouvait en attendre de la symétrie de révolution autour du faisceau incident de particules, la section efficace différentielle est indépendante de l'angle azimutal, φ . D'autre part, pour une énergie donnée, i.e., un k fixé, elle dépend de l'angle de diffusion (e.g., la section efficace est plus grande pour $\vartheta = 0$ que pour $\vartheta = \pi$). Finalement, le signe de V_0 ne joue aucun rôle, en tout cas dans l'approximation de Born.

Pour $\mu \rightarrow 0$, le potentiel de Yukawa tend vers le potentiel coulombien. En particulier, si nous posons $V_0 = Ze^2$, on retrouve la section efficace classique de Rutherford pour la diffusion d'un électron par un noyau de charge $(-Ze)$, i.e., la formule (3.33),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m_e^2}{(\hbar k)^4} \frac{V_0^2}{16 \sin^4(\vartheta/2)} = \frac{e^4 Z^2}{16E^2 \sin^4(\vartheta/2)}. \quad (3.39)$$

Pour le dernier signe d'égalité nous avons utilisé $(\hbar k)^2 = p^2 = 2m_e E$. En fait, la formule (3.39) n'est pas tout à fait correcte pour la diffusion coulombienne par un noyau. Dans le cas coulombien, le potentiel ne décroît pas assez rapidement, et notre traitement n'est donc pas valable. En effet, la portée infinie du potentiel de Coulomb induit des corrections logarithmiques dans les états asymptotiques (cf. [1], § 7.2),

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i[\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + \gamma \ln(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})]} + f(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \frac{1}{r} e^{i[kr - \gamma \ln(2kr)]}, \quad \gamma = \frac{Ze^2}{\hbar v_e}. \quad (3.40)$$

3.3 Les opérateurs de Møller Ω_{\pm} et la matrice S

Nous considérons un potentiel radial de courte portée, $r^2 V(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$, qui ne dépend pas du temps. A grande distance, l'hamiltonien $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V$ peut alors être approximé par l'hamiltonien d'une particule libre, $H^{(0)} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$. Comme la trajectoire classique tend vers des trajectoires libres, $\mathbf{x}^{in}(t)$ et $\mathbf{x}^{out}(t)$, la fonction d'onde de la mécanique quantique tend vers des fonctions d'onde libres, $\Psi^{in}(t)$ et $\Psi^{out}(t)$. Ces dernières sont des solutions de l'équation de Schrödinger libre, et nous avons

$$i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi, \quad (3.41)$$

$$i\hbar\partial_t\Psi_{in}^{out} = H^{(0)}\Psi_{in}^{out}, \quad (3.42)$$

avec la notation

$$\begin{aligned} in &= \text{particule libre incidente, } t \rightarrow -\infty, \\ out &= \text{particule libre émergente, } t \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Ces fonctions d'onde satisfont les conditions asymptotiques

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|\Psi(t) - \Psi^{in}(t)\| = 0, \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \|\Psi(t) - \Psi^{out}(t)\| = 0. \quad (3.43)$$

Ici, $\|\cdot\|$ est la norme $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, i.e., ces limites sont alors des limites fortes⁴. Soient

$$\mathcal{U}(t) = e^{-iHt/\hbar}, \quad \mathcal{U}_0(t) = e^{-iH^{(0)}t/\hbar}, \quad (3.44)$$

les opérateurs d'évolution temporelle pour les hamiltoniens H et $H^{(0)}$, respectivement. On a ainsi

$$\Psi(t) = e^{-iHt/\hbar}\Psi(0), \quad \Psi_{in}^{out}(t) = e^{-iH^{(0)}t/\hbar}\Psi_{in}^{out}(0). \quad (3.45)$$

Les conditions asymptotiques (3.43) sont donc équivalentes à

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \left\| e^{-iHt/\hbar}\Psi(0) - e^{-iH^{(0)}t/\hbar}\Psi_{in}^{out}(0) \right\| = 0, \quad (3.46)$$

ou encore

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \left\| \Psi(0) - e^{iHt/\hbar}e^{-iH^{(0)}t/\hbar}\Psi_{in}^{out}(0) \right\| = 0. \quad (3.47)$$

Ceci nous mène à la définition des *opérateurs de Møller* :

$$\boxed{\Omega_{\pm} := \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{iHt/\hbar}e^{-iH^{(0)}t/\hbar}} \quad \text{limite forte.} \quad (3.48)$$

Avec cette définition, Eqs. (3.46) et (3.47) sont équivalentes à

$$\Psi^{in}(0) = \Omega_-^* \Psi(0), \quad \Psi(0) = \Omega_- \Psi^{in}(0), \quad (3.49)$$

$$\Psi^{out}(0) = \Omega_+^* \Psi(0), \quad \Psi(0) = \Omega_+ \Psi^{out}(0). \quad (3.50)$$

⁴Une suite $\psi_n \in \mathcal{H}$ converge 'fortement' vers $\psi \in \mathcal{H}$ si $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\psi - \psi_n\| = 0$. La suite converge 'faiblement' si $\lim_{n \rightarrow \infty} (\phi, \psi - \psi_n) = 0$ pour tout $\phi \in \mathcal{H}$.

De ces relations, nous pouvons extraire

$$\Psi^{in} = \Omega_-^* \Omega_- \Psi^{in} \quad \text{et} \quad \Psi^{out} = \Omega_+^* \Omega_+ \Psi^{out} . \quad (3.51)$$

Comme les solutions Ψ^{in} ou Ψ^{out} de $H^{(0)}$ génèrent tout l'espace d'Hilbert, il s'ensuit que nous avons

$$\boxed{\Omega_{\pm}^* \Omega_{\pm} = \mathbb{I}} \quad (3.52)$$

Mais, le plus intéressant est que l'on peut écrire

$$\boxed{\Psi^{out} = \Omega_+^* \Omega_- \Psi^{in} = S \Psi^{in} , \quad S := \Omega_+^* \Omega_-} \quad (3.53)$$

Si nous connaissons l'opérateur S (ou la matrice S), nous pouvons déterminer l'état final Ψ^{out} à partir de tout état initial Ψ^{in} . Cela signifie que la matrice S contient toute l'information quant au processus de diffusion. Ceci est illustré dans la Figure 3.1.

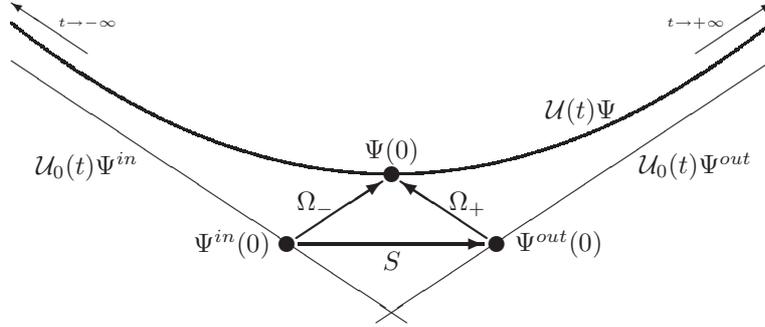


FIG. 3.1 – Illustration des états asymptotiques d'un processus de diffusion et matrice $S = \Omega_+^* \Omega_-$. Les \bullet représentent des états dans l'espace de Hilbert. Les droites correspondent au trajectoire d'une évolution non-perturbée, tandis que la courbe représente l'évolution du vecteur d'état, $\Psi(t)$.

Opérateurs isométriques et inverse

Définition 3.3.1 *Un opérateur isométrique sur \mathcal{H} est un opérateur linéaire qui est défini sur tout \mathcal{H} et qui préserve la norme.*

Les opérateurs de Møller Ω_{\pm} sont des opérateurs isométriques ; ils appartiennent donc à une classe d'opérateurs qui est plus générale que les opérateurs unitaires. Explicitement, la définition 3.3.1 signifie que $\mathcal{D}(\Omega_{\pm}) = \mathcal{H}$, mais qu'en général $\mathcal{R}(\Omega_{\pm}) \neq \mathcal{H}$. Finalement, ils préservent la norme, i.e.,

$$\|\Omega_{\pm} \Psi\| = \left\| \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{iHt/\hbar} e^{-iH^{(0)}t/\hbar} \Psi \right\| = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \left\| e^{iHt/\hbar} e^{-iH^{(0)}t/\hbar} \Psi \right\| = \|\Psi\| , \quad (3.54)$$

où nous avons utilisé la propriété de limite forte pour la deuxième égalité. Puisque $\|\Omega_{\pm} \Psi\| = \|\Psi\|$, l'état $\Omega_{\pm} \Psi$ ne peut être nul, à moins que Ψ soit identiquement nul. Ainsi, Ω_{\pm} doit posséder un inverse, Ω_{\pm}^{-1} . Toutefois, Ω_{\pm}^{-1} n'est en

général pas défini sur tout \mathcal{H} . La condition $\Omega_{\pm}^* \Omega_{\pm} = \mathbb{1}$ n'implique pas automatiquement que $\Omega_{\pm} \Omega_{\pm}^* = \mathbb{1}$, et delà, que Ω_{\pm} est unitaire. Ceci n'est le cas que si on considère des espaces de dimension finie.

Il existe une relation simple entre l'inverse Ω_{\pm}^{-1} d'un opérateur isométrique et son conjugué hermitien, Ω_{\pm}^* . Puisque $\Omega_{\pm}^* \Omega_{\pm} = \mathbb{1}$, on peut écrire

$$\Omega_{\pm}^* [\Omega_{\pm} \Psi] = \Psi, \quad \forall \Psi \in \mathcal{H}. \quad (3.55)$$

Si on substitue $\Omega_{\pm} \Psi = \Psi'$, on peut conclure que, pour tout $\Psi' \in \mathcal{R}(\Omega_{\pm})$,

$$\Omega_{\pm}^* \Psi' = \Omega_{\pm}^{-1} \Psi', \quad \forall \Psi' \in \mathcal{R}(\Omega_{\pm}). \quad (3.56)$$

Or, si Ψ' est orthogonal ⁵ à $\mathcal{R}(\Omega_{\pm})$, nous obtenons que

$$(\Psi', \Omega_{\pm} \Psi) = 0, \quad \forall \Psi \in \mathcal{H}, \quad (3.57)$$

ce qui implique $(\Omega_{\pm}^* \Psi', \Psi) = 0 \quad \forall \Psi \in \mathcal{H}$ et donc $\Omega_{\pm}^* \Psi' = 0$. Ainsi, on en déduit immédiatement que

$$\Omega_{\pm}^* = \begin{cases} \Omega_{\pm}^{-1} & \text{sur } \mathcal{R}(\Omega_{\pm}), \\ 0 & \text{sur } \mathcal{R}(\Omega_{\pm})^{\perp}. \end{cases} \quad (3.58)$$

L'image \mathcal{R} des opérateurs de Møller s'appelle l'espace des états de diffusion.

Relation d'entrelacement et conservation de l'énergie

Une des propriétés les plus importantes de l'opérateur S est qu'il conserve l'énergie. En effet, puisque l'hamiltonien H est indépendant du temps, l'énergie doit être conservée. Toutefois, comme S relie les états asymptotiques, pour lesquels seule l'énergie cinétique compte, on peut raisonnablement attendre que S commute avec l'opérateur d'énergie cinétique $H^{(0)}$, plutôt qu'avec H . Ceci se démontre aisément si l'on utilise la *relation d'entrelacement* des opérateurs de Møller,

$$\boxed{H \Omega_{\pm} = \Omega_{\pm} H^{(0)}} \quad (3.59)$$

Cette identité est obtenue d'après les manipulations suivantes :

$$\begin{aligned} e^{-iH\tilde{t}/\hbar} \Omega_{\pm} &= e^{-iH\tilde{t}/\hbar} \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{iHt/\hbar} e^{-iH^{(0)}t/\hbar} \\ &= \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{-iH\tilde{t}/\hbar} e^{iHt/\hbar} e^{-iH^{(0)}t/\hbar} \\ &= \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{iH(t-\tilde{t})/\hbar} e^{-iH^{(0)}(t-\tilde{t})/\hbar} e^{-iH^{(0)}\tilde{t}/\hbar} \\ &= \Omega_{\pm} e^{-iH^{(0)}\tilde{t}/\hbar}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

La relation d'entrelacement (3.59) est obtenue après différenciation par rapport à \tilde{t} , puis on pose $\tilde{t} = 0$.

⁵On dit que un $\Psi \in \mathcal{H}$ est orthogonal au sous-espace $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ si Ψ est orthogonal à chaque $\Phi \in \mathcal{S}$, i.e., $(\Phi, \Psi) = 0 \quad \forall \Phi \in \mathcal{S}$. Il est facile de montrer que l'ensemble de tous les vecteurs orthogonaux à un sous-espace \mathcal{S} est lui-même un sous-espace, que l'on nomme le complément orthogonal \mathcal{S}^{\perp} de \mathcal{S} ; $\mathcal{S}^{\perp} = \{\Phi \in \mathcal{H} \mid \Phi \text{ est orthogonal à } \mathcal{S}\}$ (voir compl. math II).

Comme les opérateurs de Møller sont isométriques et satisfont $\Omega_{\pm}^* \Omega_{\pm} = \mathbb{1}$, on peut réécrire la relation d'entrelacement sous la forme

$$\Omega_{\pm}^* H \Omega_{\pm} = H^{(0)} . \quad (3.61)$$

Ceci nous permet d'interpréter Ω_{\pm} comme des opérateurs dont l'action sur l'hamiltonien total H donne l'hamiltonien libre, $H^{(0)}$. Ceci montre alors clairement que les opérateurs de Møller ne peuvent être unitaire. Or, si c'était le cas, Eq. (3.61) impliquerait que H et $H^{(0)}$ auraient le même spectre ; ceci est impossible puisque, comme $H^{(0)}$ n'a pas d'état lié, il s'ensuit que H ne pourrait pas en avoir.

Par une double application de la relation d'entrelacement, nous pouvons montrer que S commute avec $H^{(0)}$. En effet,

$$S H^{(0)} = \Omega_+^* \Omega_- H^{(0)} = \Omega_+^* H \Omega_- = H^{(0)} \Omega_+^* \Omega_- = H^{(0)} S . \quad (3.62)$$

Ce résultat exprime la conservation de l'énergie dans un processus de diffusion, puisque l'on a $H^{(0)} = S^* H^{(0)} S$. En effet, l'énergie dans l'état initial est donnée par la valeur moyenne $\langle \Psi^{in}, H^{(0)} \Psi^{in} \rangle$, tandis que dans l'état final nous avons $\langle \Psi^{out}, H^{(0)} \Psi^{out} \rangle = \langle \Psi^{in}, S^* H^{(0)} S \Psi^{in} \rangle$.

Théorème d'orthogonalité

Nous supposons que les opérateurs de Møller Ω_{\pm} sont définis sur tout l'espace d'Hilbert \mathcal{H} (ceci requiert certaines conditions pour le potentiel V , e.g., qu'il soit de courte portée $r^2 V(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$), i.e., $\mathcal{D}(\Omega_{\pm}) = \mathcal{H}$. Soient \mathcal{R}_{\pm} les images de Ω_{\pm} , i.e., $\mathcal{R}_{\pm} = \Omega_{\pm} \mathcal{H}$. La propriété (3.59) implique que

$$e^{-iHt/\hbar} \Omega_{\pm} = \Omega_{\pm} e^{-iH^{(0)}t/\hbar} . \quad (3.63)$$

Ainsi,

$$e^{-iHt/\hbar} \mathcal{R}_{\pm} = \Omega_{\pm} e^{-iH^{(0)}t/\hbar} \mathcal{H} \subset \mathcal{R}_{\pm} . \quad (3.64)$$

En d'autres termes, ceci signifie que \mathcal{R}_{\pm} est invariant sous l'évolution avec H et $H|_{\mathcal{R}_{\pm}}$ est équivalent à $H^{(0)}|_{\mathcal{R}_{\pm}}$ par conjugaison avec l'opérateur Ω_{\pm} , qui est unitaire sur \mathcal{R}_{\pm} . Plus précisément, comme Ω_{\pm} est isométrique, $\Omega|_{\mathcal{R}_{\pm}}$ est unitaire sur l'espace \mathcal{R}_{\pm} . En plus, sur \mathcal{R}_{\pm} , on a $e^{-iHt/\hbar}|_{\mathcal{R}_{\pm}} = \Omega_{\pm} e^{-iH^{(0)}t/\hbar} \Omega_{\pm}^*$. Avec $H^{(0)}$, H a donc un spectre purement continu sur \mathcal{R}_{\pm} . On peut alors raisonnablement attendre que $\mathcal{R}_{\pm}^{\perp} = \mathcal{R}(\Omega_{\pm})^{\perp} =: \mathcal{B}$ soit le sous-espace des états liés. On peut alors formuler le *théorème d'orthogonalité* :

Théorème 3.3.1 *Si le potentiel de diffusion V satisfait aux conditions usuelles, alors $\mathcal{R}_+ \perp \mathcal{B}$ et $\mathcal{R}_- \perp \mathcal{B}$, où \mathcal{B} est le sous-espace des états liés.*

Complétude asymptotique

Si on ne demande pas seulement que $\mathcal{R}_{\pm} \perp \mathcal{B}$, mais aussi que $\mathcal{B} = (\mathcal{R}_{\pm})^{\perp}$ on appelle la diffusion 'asymptotiquement complète'. Dans cette situation, on trouve donc $\mathcal{R}_+ = \mathcal{R}_- = \mathcal{B}^{\perp} \equiv \mathcal{R}$, et $\mathcal{R} + \mathcal{B} = \mathcal{H}$. Nous répétons les conditions de la complétude asymptotique :

- L'ensemble de tous les états $\Psi = \Omega_- \Psi^{in}$ est précisément le même que l'ensemble de tous les états $\Psi = \Omega_+ \Psi^{out}$, i.e., $\mathcal{R}_+ = \mathcal{R}_- = \mathcal{R}$.

- Le sous-espace \mathcal{R} et le sous-espace des états liés \mathcal{B} couvrent tout l'espace de Hilbert, \mathcal{H} . Comme nous savons que \mathcal{R} est orthogonal à \mathcal{B} , cela signifie que \mathcal{H} doit être la somme directe de \mathcal{R} et $\mathcal{B} = \mathcal{R}^\perp$, c'est-à-dire $\mathcal{R} \oplus \mathcal{B} = \mathcal{H}$.

La preuve, valable uniquement sous certaines conditions du potentiel, que la théorie de la diffusion est asymptotiquement complète est compliquée, voir [15, 16].

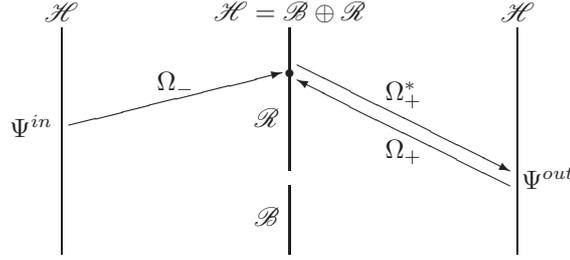


FIG. 3.2 – Illustration schématique de la complétude asymptotique.

Unitarité de l'opérateur S

L'unitarité de l'opérateur S est une conséquence directe de la complétude asymptotique. En effet, nous avons $\Omega_\pm^* \Omega_\pm = \mathbb{I}$ et $\Omega_\pm \Omega_\pm^* = P_{\mathcal{R}_\pm} = P_{\mathcal{R}}$, où $P_{\mathcal{R}}$ est le projecteur sur le sous-espace $\mathcal{R} \subset \mathcal{H}$. Ceci implique alors

$$S^* S = \Omega_-^* \Omega_+ \Omega_+^* \Omega_- = \Omega_-^* P_{\mathcal{R}} \Omega_- = \Omega_-^* \Omega_- = \mathbb{I}, \quad (3.65)$$

$$S S^* = \Omega_+^* \Omega_- \Omega_-^* \Omega_+ = \Omega_+^* P_{\mathcal{R}} \Omega_+ = \Omega_+^* \Omega_+ = \mathbb{I}. \quad (3.66)$$

3.3.1 Calcul perturbatif de la matrice S

Nous considérons un système avec hamiltonien

$$H = H^{(0)} + H^{(P)}, \quad H^{(P)} = \lambda V. \quad (3.67)$$

Nous voulons exprimer la matrice de diffusion S en série de puissances de λ . Dans ce but, nous définissons tout d'abord

$$\Omega(t) := e^{iHt/\hbar} e^{-iH^{(0)}t/\hbar}, \quad (3.68)$$

ce qui implique

$$\Omega_- = \lim_{t \rightarrow -\infty} \Omega(t), \quad \Omega_+ = \lim_{t \rightarrow +\infty} \Omega(t). \quad (3.69)$$

L'opérateur de Møller incident, Ω_- , transforme les ondes de diffusion incidentes en solutions exactes de l'équation de Schrödinger, tandis que l'opérateur de Møller émergent, Ω_+ , transforme ondes de diffusion émergentes en solutions exactes. Soit Ψ un état de diffusion, nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} [\partial_t \Omega(t)] \Psi &= \frac{i}{\hbar} e^{iHt/\hbar} (H - H^{(0)}) e^{-iH^{(0)}t/\hbar} \Psi \\ &= \lambda \frac{i}{\hbar} e^{iHt/\hbar} V e^{-iH^{(0)}t/\hbar} \Psi. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Comme $\Omega(0) = \mathbb{I}$, il s'ensuit que

$$\Omega(t)\Psi = \Psi + \lambda \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{iHt'/\hbar} V e^{-iH^{(0)}t'/\hbar} \Psi, \quad (3.71)$$

$$\Omega(t) = \mathbb{I} + \lambda \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \underbrace{e^{iHt'/\hbar} e^{-iH^{(0)}t'/\hbar}}_{\Omega(t')} e^{iH^{(0)}t'/\hbar} V e^{-iH^{(0)}t'/\hbar}, \quad (3.72)$$

et donc

$$\Omega^*(t) = \mathbb{I} + \lambda(i\hbar)^{-1} \int_0^t dt' e^{iH^{(0)}t'/\hbar} V e^{-iH^{(0)}t'/\hbar} \Omega^*(t'). \quad (3.73)$$

En itérant cette dernière équation intégrale, nous obtenons

$$\Omega^*(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \Omega^{(n)*}, \quad (3.74)$$

avec

$$\Omega^{(0)*} = \mathbb{I}, \quad (3.75)$$

$$\begin{aligned} \Omega^{(n)*} = & (i\hbar)^{-n} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \times \\ & e^{iH^{(0)}t_1/\hbar} V e^{-iH^{(0)}(t_1-t_2)/\hbar} \cdots e^{-iH^{(0)}(t_{n-1}-t_n)/\hbar} V e^{-iH^{(0)}t_n/\hbar}. \end{aligned} \quad (3.76)$$

Nous supposons que cette série converge. Ceci est relativement facile à démontrer si $V \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{L}^\infty(\mathbb{R}^3)$. Mais ceci est également vrai pour une classe de potentiel beaucoup plus vaste. Finalement, on a encore

$$\Omega_{\pm}^* = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \Omega^*(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \Omega^{(n)*}(t). \quad (3.77)$$

Série de puissances pour S

L'expansion en série de puissances pour l'opérateur de diffusion S est facile à trouver dans la représentation intermédiaire. Dans cette optique, nous posons

$$\Psi(t) = e^{-iH^{(0)}t/\hbar} \varphi(t) \quad \text{et} \quad V_I(t) := e^{iH^{(0)}t/\hbar} V e^{-iH^{(0)}t/\hbar}. \quad (3.78)$$

Pour φ , l'équation de Schrödinger se réduit à

$$i\hbar \partial_t \varphi = \lambda V_I(t) \varphi, \quad (3.79)$$

où

$$\varphi(t) = e^{iH^{(0)}t/\hbar} \Psi(t) = e^{iH^{(0)}t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} \Psi(0) = \Omega^*(t) \Psi(0). \quad (3.80)$$

D'après Eq. (3.77), nous avons

$$\left. \begin{aligned} \varphi(-\infty) &= \lim_{t \rightarrow -\infty} \varphi(t) = \Omega_-^* \Psi(0) \\ \varphi(+\infty) &= \lim_{t \rightarrow +\infty} \varphi(t) = \Omega_+^* \Psi(0) \end{aligned} \right\} \rightarrow \varphi(+\infty) = \Omega_+^* \Omega_- \varphi(-\infty), \quad (3.81)$$

ce qui implique immédiatement

$$\varphi(+\infty) = S\varphi(-\infty) . \quad (3.82)$$

D'autre part, si on intègre l'équation (3.79), on obtient

$$\varphi(t) = \varphi(-\infty) - \lambda \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_I(t') \varphi(t') , \quad (3.83)$$

ce qui, après itérations, donne

$$\varphi(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n (i\hbar)^{-n} \int_{-\infty}^t dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n V_I(t_1) \cdots V_I(t_n) \varphi(-\infty) . \quad (3.84)$$

Pour $t \rightarrow \infty$, ceci engendre une série de puissance pour la matrice S :

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n S^{(n)} , \quad (3.85)$$

avec

$$S^{(0)} = \mathbb{1} , \quad (3.86)$$

$$S^{(n)} = (i\hbar)^{-n} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n V_I(t_1) \cdots V_I(t_n) \quad (3.87)$$

$$= \frac{(i\hbar)^{-n}}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n T(V_I(t_1) \cdots V_I(t_n)) . \quad (3.88)$$

où l'opérateur chronologique $T(V_I(t_1) \cdots V_I(t_n)) = V_I(t_{i_1}) \cdots V_I(t_{i_n})$ est tel que $t_{i_1} \geq \cdots \geq t_{i_n}$. La série (3.88) est de nouveau la série de Dyson (voir chap. II). Cette série joue un rôle central en théorie des champs.

3.3.2 Amplitude de diffusion et section efficace

Pour $\Phi, \Psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ (espace de Schwartz), nous considérons l'élément de matrice $(\Phi, S\Psi)$. D'après le théorème de Schwartz, il existe une unique distribution $S' \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^6)$ telle que le fonctionnel $(\Phi, S\Psi)$, qui est linéaire en Ψ et anti-linéaire en Φ , soit donné par

$$(\Phi, S\Psi) = S'(\Phi^* \otimes \Psi) . \quad (3.89)$$

Comme dans le cours sur les distributions (cf. Compl. Math II), nous écrivons formellement

$$S'(\Phi^* \otimes \Psi) = \int d^3k' d^3k \tilde{\Phi}^*(\mathbf{k}') \langle \mathbf{k}' | S | \mathbf{k} \rangle \tilde{\Psi}(\mathbf{k}) , \quad (3.90)$$

où nous avons choisi la représentation par les transformées de Fourier $\tilde{\Phi}$ et $\tilde{\Psi}$ (représentation dans l'espace des impulsions). D'après notre expansion de la matrice S , Eqs. (3.85)–(3.88), les contributions d'ordre successif à $\langle \mathbf{k}' | S | \mathbf{k} \rangle$ sont données par

Ordre λ^0 :

$$\langle \mathbf{k}' | S^{(0)} | \mathbf{k} \rangle = \delta^3(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) . \quad (3.91)$$

Ordre λ^1 :

$$\begin{aligned}
(\Phi, S^{(1)}\Psi) &= (i\hbar)^{-1} \left(\Phi, \int_{-\infty}^{\infty} dt V_I(t)\Psi \right) = (i\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt (\Phi, V_I(t)\Psi) \\
&= (i\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\Phi, e^{iH^{(0)}t/\hbar} V e^{-iH^{(0)}t/\hbar} \Psi \right) \\
&= (i\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt (\Phi_t, V\Psi_t) = (i\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\tilde{\Phi}_t, \widetilde{V\Psi}_t \right), \quad (3.92)
\end{aligned}$$

où $\Phi_t = e^{-iH^{(0)}t/\hbar}\Phi$ et $\Psi_t = e^{-iH^{(0)}t/\hbar}\Psi$ sont des solutions de l'équation de Schrödinger libre avec conditions initiales Φ et Ψ au temps $t = 0$. On a alors

$$\tilde{\Phi}_t(\mathbf{k}) = \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) e^{-i\frac{\mathbf{p}^2 t}{2\hbar m}} = \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) e^{-i\hbar\frac{\mathbf{k}^2 t}{2m}}, \quad (3.93)$$

$$\widetilde{V\Psi}_t(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(\tilde{V} * \tilde{\Psi}_t(\mathbf{k}) \right), \quad (3.94)$$

où nous avons utilisé $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ et $*$ représente le produit de convolution, défini tel que

$$(f * g)(\mathbf{k}') = \int d^3k f(\mathbf{k}' - \mathbf{k})g(\mathbf{k}). \quad (3.95)$$

Appliqué à Eq. (3.92), nous obtenons

$$\begin{aligned}
(\Phi, S^{(1)}\Psi) &= \frac{(i\hbar)^{-1}}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3k' d^3k \tilde{\Phi}^*(\mathbf{k}') \tilde{V}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \tilde{\Psi}(\mathbf{k}) e^{\frac{i\hbar}{2m}(\mathbf{k}'^2 - \mathbf{k}^2)} \\
&= \frac{(i\hbar)^{-1}}{\sqrt{2\pi}} \int d^3k' d^3k \tilde{\Phi}^*(\mathbf{k}') \delta\left(\frac{\hbar(\mathbf{k}'^2 - \mathbf{k}^2)}{2m}\right) \tilde{V}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \tilde{\Psi}(\mathbf{k}) \\
&= \frac{(i\hbar^2)^{-1}}{\sqrt{2\pi}} \int d^3k' d^3k \tilde{\Phi}^*(\mathbf{k}') \delta\left(\frac{\mathbf{k}'^2 - \mathbf{k}^2}{2m}\right) \tilde{V}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \tilde{\Psi}(\mathbf{k}). \quad (3.96)
\end{aligned}$$

Pour le deuxième signe d'égalité nous avons utilisé que $\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\alpha t} = 2\pi\delta(\alpha)$. Ce résultat nous permet finalement d'écrire

$$\langle \mathbf{k}' | S^{(1)} | \mathbf{k} \rangle = \frac{-i}{\sqrt{2\pi}} \delta\left(\frac{\mathbf{p}'^2 - \mathbf{p}^2}{2m}\right) \tilde{V}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}). \quad (3.97)$$

La distribution δ exprime la conservation d'énergie. (Le facteur \hbar^{-2} est absorbé dans la fonction δ où nous avons remplacé \mathbf{k}^2 par \mathbf{p}^2 .) En général, on introduit un nouvel opérateur, la matrice T , et l'on pose

$$\langle \mathbf{k}' | S | \mathbf{k} \rangle = \delta^3(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) - 2\pi i \delta\left(\frac{\mathbf{p}'^2 - \mathbf{p}^2}{2m}\right) \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle. \quad (3.98)$$

La signification des deux termes de cette décomposition de la matrice S est évidente. Le premier terme, $\delta^3(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$, représente l'amplitude que la particule traverse le potentiel sans être diffusée; le deuxième terme correspond donc à l'amplitude que la particule soit diffusée. Or, quand une particule est diffusée, son impulsion est modifiée, mais l'énergie reste la même. Donc, le deuxième terme dans Eq. (3.98) doit conserver l'énergie, mais pas forcément les composantes individuelles d'impulsion (nous n'avons pas d'invariance sous translations

dans notre problème). Ceci implique que ce terme doit contenir une fonction δ de Dirac pour l'énergie. Par contre, $\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle$ doit être une fonction lisse, sans fonction δ additionnelle. Ceci peut être démontré avec certaines conditions sur le potentiel.

En comparant Eqs. (3.91), (3.97) et (3.98), l'expansion au premier ordre donne

$$\boxed{\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle}_B = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{V}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \quad (3.99)$$

Finalement, il est intéressant de comparer cette dernière expression avec le résultat obtenu dans l'approximation de Born, Eq. (3.19). Avec la normalisation de la transformation de Fourier,

$$\tilde{g}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} g(\mathbf{x}) . \quad (3.100)$$

nous obtenons

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k})_B = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle_B . \quad (3.101)$$

Comme nous le verrons par la suite, cette identité est vraie ordre par ordre. En effet, nous avons

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle , \quad \text{et alors} \quad (3.102)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(4\pi^2 m)^2}{\hbar^4} |\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle|^2 . \quad (3.103)$$

3.3.3 Le théorème optique

Pour explorer plus en détails la structure de la matrice S dans l'espace des impulsions, nous introduisons un nouvel opérateur R défini par la relation $S = \mathbb{1} + R$. Evidemment, R représente la différence entre la valeur de S et sa valeur en l'absence de toute interaction ($S = \mathbb{1}$). Comme S commute avec $H^{(0)}$, il en est de même pour R . L'unitarité de l'opérateur de diffusion, $SS^* = S^*S = \mathbb{1}$, implique immédiatement

$$R + R^* + RR^* = R + R^* + R^*R = 0 . \quad (3.104)$$

D'autre part, Eq. (3.98) implique que, dans l'espace des impulsions, nous avons

$$\langle \mathbf{k}' | R | \mathbf{k} \rangle = -2\pi i \delta\left(\frac{\mathbf{p}'^2 - \mathbf{p}^2}{2m}\right) \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle . \quad (3.105)$$

Ainsi, nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \mathbf{k}' | R | \mathbf{k} \rangle + \langle \mathbf{k}' | R^* | \mathbf{k} \rangle + \langle \mathbf{k}' | R^* R | \mathbf{k} \rangle , \\ &= \langle \mathbf{k}' | R | \mathbf{k} \rangle + \langle \mathbf{k}' | R^* | \mathbf{k} \rangle + \int d^3k'' \langle \mathbf{k}' | R^* | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | R | \mathbf{k} \rangle , \\ &= -2\pi i \delta\left(\frac{\mathbf{p}'^2 - \mathbf{p}^2}{2m}\right) \left[\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle - \overline{\langle \mathbf{k} | T | \mathbf{k}' \rangle} \right] \\ &\quad - (2\pi i)^2 \int d^3k'' \delta\left(\frac{\mathbf{p}''^2 - \mathbf{p}'^2}{2m}\right) \delta\left(\frac{\mathbf{p}''^2 - \mathbf{p}^2}{2m}\right) \overline{\langle \mathbf{k}'' | T | \mathbf{k}' \rangle} \langle \mathbf{k}'' | T | \mathbf{k} \rangle . \end{aligned} \quad (3.106)$$

Si on pose $d^3k'' = \frac{1}{2}k''d(k''^2)d\Omega_{k''}$, et on utilise $p'^2 = \hbar^2k''^2$, l'intégration sur $d(k''^2)$ donne

$$\frac{1}{2i} \left[\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle - \overline{\langle \mathbf{k} | T | \mathbf{k}' \rangle} \right] = -\frac{\pi m k}{\hbar^2} \int d\Omega_{k''} \overline{\langle \mathbf{k}'' | T | \mathbf{k}' \rangle} \langle \mathbf{k}'' | T | \mathbf{k} \rangle, \quad (3.107)$$

avec $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}''| = p/\hbar$. Dans la direction incidente, nous avons $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$, ce qui donne le *théorème optique*⁶ :

$$\boxed{\text{Im}(\langle \mathbf{k} | T | \mathbf{k} \rangle) = -\frac{\pi m p}{\hbar^3} \int d\Omega_{k''} |\langle \mathbf{k}'' | T | \mathbf{k} \rangle|^2 = -\frac{p\hbar}{2m(2\pi)^3} \sigma(\mathbf{p})} \quad (3.108)$$

Exprimé en fonction de l'amplitude de diffusion, Eq. (3.102), ceci donne

$$\boxed{\text{Im}(f(\mathbf{k}, \mathbf{k})) = \frac{k}{4\pi} \sigma(\mathbf{k})} \quad (3.109)$$

où $\sigma(\mathbf{k})$ dénote la section efficace totale de diffusion pour une impulsion incidente $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$,

$$\sigma(\mathbf{k}) = \int d\Omega_{k'} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (3.110)$$

En conclusion, si on peut mesurer la partie imaginaire (absorption) de l'amplitude de diffusion dans la direction incidente, ceci détermine la section efficace totale. A noter que comme la section efficace σ n'est jamais négative, $\text{Im}(f(\mathbf{k}, \mathbf{k}))$ ne peut être négative. (Dans la direction incidente, l'intensité ne peut que diminuer à cause de la diffusion.)

3.3.4 Les équations de Lippmann et Schwinger ($\hbar = 1$)

Proposition 3.3.1 *Soit $(\Psi_t)_t$ un ensemble de vecteurs dans un espace d'Hilbert \mathcal{H} avec limite forte Ψ_∞ . C'est-à-dire $\lim_{t \rightarrow \infty} \|\Psi_t - \Psi_\infty\| = 0$ et $\|\Psi_t\| < C$. Dans ce cas, on a*

$$\lim_{\epsilon \searrow 0} \epsilon \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} \Psi_t = \Psi_\infty. \quad (3.111)$$

En d'autres termes, le membre de gauche de l'équation existe et il est égal au membre de droite.

Preuve :

Soit

$$\chi_\epsilon := \epsilon \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} \Psi_t - \Psi_\infty = \epsilon \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} (\Psi_t - \Psi_\infty). \quad (3.112)$$

Il faut montrer que pour tout δ donné il existe un $\epsilon > 0$ tel que $\|\chi_\epsilon\| < \delta$. Or,

⁶On le nomme ainsi par analogie avec la relation obtenue lors de la diffusion élastique d'ondes électromagnétiques.

on a

$$\begin{aligned}
\|\chi_\epsilon\| &\leq \epsilon \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} \|\Psi_t - \Psi_\infty\| \\
&= \epsilon \left(\int_0^T dt e^{-\epsilon t} \|\Psi_t - \Psi_\infty\| + \int_T^\infty dt e^{-\epsilon t} \|\Psi_t - \Psi_\infty\| \right) \\
&= \epsilon \int_0^T dt \underbrace{\|\Psi_t - \Psi_\infty\|}_{\leq 2C} + \epsilon \int_T^\infty dt e^{-\epsilon t} \|\Psi_t - \Psi_\infty\| . \quad (3.113)
\end{aligned}$$

Nous choisissons T tel que $\|\Psi_t - \Psi_\infty\| < \delta/2$ pour $t \geq T$ et $\epsilon < \delta/(4CT)$. Alors,

$$\|\chi_\epsilon\| \leq \epsilon \cdot 2CT + \frac{\delta}{2} \epsilon \int_T^\infty dt e^{-\epsilon t} < \epsilon \cdot 2CT + \frac{\delta}{2} < \delta . \quad (3.114)$$

■

L'expression $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\epsilon \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} \Psi_t]$ est appelée la *limite abélienne* de Ψ_t . Elle est souvent définie même si $(\Psi_t)_t$ n'a pas de limite forte. Par exemple, il est facile de voir que la limite abélienne de $\Psi_t = e^{iH^{(0)}/\hbar t} e^{-iHt/\hbar} \chi$ existe pour tout $\chi \in \mathcal{H}$, même si cette expression ne peut pas avoir de limite forte si χ est un état lié de l'hamiltonien H (cf. [1]). On peut alors écrire les opérateurs de Møller et leurs adjoints comme limites abéliennes qui sont définies sur tout l'espace d'Hilbert \mathcal{H} .

$$\Omega_\pm = \lim_{\epsilon \searrow 0} \pm \frac{\epsilon}{\hbar} \int_0^{\pm\infty} dt e^{\mp\epsilon t/\hbar} e^{iHt/\hbar} e^{-iH^{(0)}t/\hbar} , \quad (3.115)$$

$$\Omega_\pm^* = \lim_{\epsilon \searrow 0} \pm \frac{\epsilon}{\hbar} \int_0^{\pm\infty} dt e^{\mp\epsilon t/\hbar} e^{iH^{(0)}t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} . \quad (3.116)$$

Ici nous avons remplacé ϵ par ϵ/\hbar pour simplifier la notation plus loin. Comme ça, ϵ a la dimension d'une énergie. Nous utilisons encore que $\Omega_\pm = \lim_{t \rightarrow \infty} \Omega(t)$ et $\Omega(t) = e^{iHt/\hbar} e^{-iH^{(0)}t/\hbar}$. De plus, nous avons (cf. Eqs. (3.70) et (3.71))

$$\partial_t \Omega(t) = \frac{i}{\hbar} e^{iHt/\hbar} V e^{-iH^{(0)}t/\hbar} , \quad (3.117)$$

$$\Omega(t) = \mathbb{I} + \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{iHt'/\hbar} V e^{-iH^{(0)}t'/\hbar} , \quad (3.118)$$

donc

$$\Omega_\pm = \mathbb{I} + \lim_{\epsilon \searrow 0} \left[\pm \frac{\epsilon}{\hbar} \int_0^{\pm\infty} dt e^{\mp\epsilon t/\hbar} \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{iHt'/\hbar} V e^{-iH^{(0)}t'/\hbar} dt' \right] . \quad (3.119)$$

Une intégration par partie sur $\int_0^{\pm\infty} dt$ donne

$$\Omega_\pm = \mathbb{I} + \lim_{\epsilon \searrow 0} \frac{i}{\hbar} \int_0^{\pm\infty} dt e^{\mp\epsilon t/\hbar} e^{iHt/\hbar} V e^{-iH^{(0)}t/\hbar} , \quad (3.120)$$

$$\Omega_\pm^* = \mathbb{I} - \lim_{\epsilon \searrow 0} \frac{i}{\hbar} \int_0^{\pm\infty} dt e^{\mp\epsilon t/\hbar} e^{iH^{(0)}t/\hbar} V e^{-iHt/\hbar} . \quad (3.121)$$

On peut donc lentement "éteindre" le potentiel pour t grand, $V \rightarrow e^{-\epsilon t/\hbar} V$.

Connection avec la théorie stationnaire

Nous considérons maintenant des états incidents à impulsion fixe (états non-normalisables). Soient

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} , \quad (3.122)$$

$$(\Psi_{\mathbf{k}'}, \Psi_{\mathbf{k}}) = (2\pi)^{-3} \int d^3x e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{x}} = \delta^3(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) . \quad (3.123)$$

Nous posons (formellement)

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{\pm} = \Omega_{\pm} \Psi_{\mathbf{k}} , \quad (3.124)$$

tel que

$$\Psi_{\mathbf{k}} = \Omega_{\pm}^* \Psi_{\mathbf{k}}^{\pm} , \quad (3.125)$$

$$(\Psi_{\mathbf{k}'}^{\pm}, \Psi_{\mathbf{k}}^{\pm}) = (\Psi_{\mathbf{k}'}, \Psi_{\mathbf{k}}) = \delta^3(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) . \quad (3.126)$$

D'après Eq. (3.59) (propriété d'entrelacement), $\Omega_{\pm} H^{(0)} = H \Omega_{\pm}$, on a

$$H \Psi_{\mathbf{k}}^{\pm} = E \Psi_{\mathbf{k}}^{\pm} , \quad E = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} . \quad (3.127)$$

Pour $\Psi \in \mathcal{H}$ quelconque avec transformée de Fourier $\tilde{\Psi}(\mathbf{k})$, on a

$$\Psi(\mathbf{x}) = \int d^3k \tilde{\Psi}(\mathbf{k}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) , \quad (3.128)$$

$$\Psi^{\pm}(\mathbf{x}) = \int d^3k \tilde{\Psi}(\mathbf{k}) \Psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{x}) . \quad (3.129)$$

D'après (3.120), nous avons également $(\Psi_{\mathbf{k}}^{\pm} = \Omega_{\pm} \Psi_{\mathbf{k}})$

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{\pm} = \Psi_{\mathbf{k}} + \frac{i}{\hbar} \lim_{\epsilon \searrow 0} \int_0^{\pm\infty} dt e^{it(H-E \pm i\epsilon)/\hbar} V \Psi_{\mathbf{k}} , \quad (3.130)$$

i.e.,

$$\boxed{\Psi_{\mathbf{k}}^{\pm} = \Psi_{\mathbf{k}} - \lim_{\epsilon \searrow 0} \frac{1}{H - E \pm i\epsilon} V \Psi_{\mathbf{k}}} \quad (3.131)$$

On remarque que $H - E$ a un spectre purement réel. Ainsi, $[H - E \pm i\epsilon]^{-1}$ est bien défini pour tout $\epsilon > 0$. Suivant la même approche, on peut utiliser $\Psi_{\mathbf{k}} = \Omega_{\pm}^* \Psi_{\mathbf{k}}^{\pm}$ pour obtenir

$$\boxed{\Psi_{\mathbf{k}}^{\pm} = \Psi_{\mathbf{k}} - \lim_{\epsilon \searrow 0} \frac{1}{H^{(0)} - E \pm i\epsilon} V \Psi_{\mathbf{k}}^{\pm}} \quad (3.132)$$

Les équations (3.131) et (3.132) sont les *équations de Lippmann et Schwinger*. Pour mieux les comprendre, explicitons l'équation (3.132), par exemple. La fonction de Green $(H^{(0)} - E \pm i\epsilon)^{-1}$ dans l'espace des positions est (exercice)

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\lim_{\epsilon \searrow 0}}{(2\pi)^3} \int d^3k' \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{x}'-\mathbf{x})}}{\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k}'^2 - \mathbf{k}^2) \pm i\epsilon} = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\mp ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} , \quad (3.133)$$

ce qui implique

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{x}) = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\mp ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \Psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{x}') . \quad (3.134)$$

Cette dernière expression correspond à Eq. (3.13) de la théorie de diffusion stationnaire.

Equation intégrale pour T

Avec les relations de Lippmann-Schwinger, nous voulons encore dériver une équation intégrale pour la matrice T définie telle que (cf. Eq. (3.98))

$$\langle \mathbf{k}' | S | \mathbf{k} \rangle = \delta^3(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) - 2\pi i \delta(E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k})) \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle . \quad (3.135)$$

Or, nous avons

$$\langle \mathbf{k}' | S | \mathbf{k} \rangle = (\Psi_{\mathbf{k}'}, S\Psi_{\mathbf{k}}) = (\Psi_{\mathbf{k}'}, \Omega_+^* \Omega_- \Psi_{\mathbf{k}}) = (\Psi_{\mathbf{k}'}^+, \Psi_{\mathbf{k}}^-) . \quad (3.136)$$

En utilisant successivement Eqs. (3.135), (3.136), (3.126) (3.131), nous avons

$$\begin{aligned} & 2\pi i \delta(E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}')) \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle \\ &= \langle \mathbf{k}' | S | \mathbf{k} \rangle - \delta^3(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \\ &= (\Psi_{\mathbf{k}'}^+ - \Psi_{\mathbf{k}'}^-, \Psi_{\mathbf{k}}^-) \\ &= \left(\lim_{\epsilon \searrow 0} \left[\frac{-1}{H - E' + i\epsilon} + \frac{1}{H - E' - i\epsilon} \right] V \Psi_{\mathbf{k}'}, \Psi_{\mathbf{k}}^- \right) . \end{aligned} \quad (3.137)$$

Mais (cf. [14], distributions)

$$\frac{1}{H - E' \pm i\epsilon} = V.P. \frac{1}{H - E'} \mp \pi i \delta(H - E') , \quad (3.138)$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} 2\pi i \delta(E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}')) \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle &= 2\pi i (\delta(H - E') V \Psi_{\mathbf{k}'}, \Psi_{\mathbf{k}}^-) \\ &= 2\pi i (\Psi_{\mathbf{k}'}^-, V \delta(H - E') \Psi_{\mathbf{k}}^-) \\ &= 2\pi i \delta(E - E') (\Psi_{\mathbf{k}'}^-, V \Psi_{\mathbf{k}}^-) . \end{aligned} \quad (3.139)$$

Finalement, on obtient

$$\boxed{\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = (\Psi_{\mathbf{k}'}, V \Psi_{\mathbf{k}}^-) \quad \text{et} \quad \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = (\Psi_{\mathbf{k}'}^+, V \Psi_{\mathbf{k}})} \quad (3.140)$$

Avec les équations de Lippmann et Schwinger, nous obtenons les équations intégrales suivantes ($(\Psi_{\mathbf{k}'}, V \Psi_{\mathbf{k}}) \equiv \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle$) :

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle - \int d^3k'' \frac{\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | T | \mathbf{k} \rangle}{E'' - E - i\epsilon} , \quad (3.141)$$

$$\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle - \int d^3k'' \frac{\langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | V | \mathbf{k} \rangle}{E'' - E - i\epsilon} . \quad (3.142)$$

Avec les équations (3.140), nous pouvons maintenant montrer la relation entre l'amplitude de diffusion f et la matrice T . D'après Eq. (3.17), on a

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int d^3 x' \frac{e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{x}') \Psi_{\mathbf{k}}^-(\mathbf{x}') \\ &= -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} (\Psi_{\mathbf{k}'}, V\Psi_{\mathbf{k}}^-) , \end{aligned} \quad (3.143)$$

ce qui implique

$$\boxed{f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle} \quad (3.144)$$

Ceci démontre que ce que nous avons trouvé pour l'approximation de Born, Eq. (3.101), est vrai aussi pour les f et T non-perturbative et alors à tout ordre dans le potentiel.

3.3.5 Décomposition partielle de l'onde diffusée

Nous considérons un potentiel à symétrie sphérique, $V = V(r)$, qui décroît suffisamment rapidement tel que $\int_0^\infty r^2 V(r) dr < \infty$. Nous écrivons l'équation de Schrödinger stationnaire à énergie $E > 0$ sous la forme

$$[\Delta + k^2 - U(r)] \Psi(\mathbf{x}) = 0 , \quad (3.145)$$

où $k^2 = 2mE\hbar^{-2}$ et $U = 2mV\hbar^{-2}$. Comme le potentiel possède la symétrie sphérique, pour un vecteur d'onde incident, \mathbf{k} , donné, la solution ne dépend de la direction $\hat{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{r}$ que par l'angle ϑ entre $\hat{\mathbf{x}}$ et $\hat{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{k}$, c'est-à-dire $\cos(\vartheta) = \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{k}}$. Nous pouvons alors poser

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{\ell} i^{\ell} (2\ell + 1) R_{\ell}(r) P_{\ell}(\cos(\vartheta)) . \quad (3.146)$$

Le théorème d'addition des harmoniques sphériques,

$$(2\ell + 1) P_{\ell}(\cos(\vartheta)) = 4\pi \sum_m \bar{Y}_{\ell, m}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{\ell, m}(\hat{\mathbf{x}}) , \quad (3.147)$$

Eq. (??), nous permet d'écrire aussi

$$\Psi(\mathbf{x}) = 4\pi \sum_{\ell, m} i^{\ell} R_{\ell}(r) \bar{Y}_{\ell, m}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{\ell, m}(\hat{\mathbf{x}}) . \quad (3.148)$$

D'après les identités (voir Chapitre 1)

$$\Delta = \partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta, \varphi} , \quad (3.149)$$

$$\Delta_{\vartheta, \varphi} = \frac{1}{\sin(\vartheta)} \partial_{\vartheta} [\sin(\vartheta) \partial_{\vartheta}] + \frac{1}{\sin^2(\vartheta)} \partial_{\varphi}^2 , \quad (3.150)$$

$$\Delta_{\vartheta, \varphi} Y_{\ell, m}(\hat{\mathbf{x}}) = -\ell(\ell + 1) Y_{\ell, m}(\hat{\mathbf{x}}) , \quad (3.151)$$

l'équation de Schrödinger (3.145) implique que les fonctions $R_{\ell}(r)$ doivent satisfaire l'équation différentielle radiale

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} + k^2 - U(r) \right] R_{\ell}(r) = 0 , \quad (3.152)$$

avec développement asymptotique $R_\ell \xrightarrow{r \ll 1} A_\ell r^\ell$. D'autre part, en l'absence du potentiel, $U(r) \equiv 0$, Eq. (3.152) se réduit à

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{d}{dz} - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2} + 1 \right] X_\ell(z) = 0 \quad \text{où } x = kr . \quad (3.153)$$

Les solutions de cette équation différentielle sont les combinaisons linéaires des fonctions de Bessel sphériques, $j_\ell(z)$ et $y_\ell(z)$. Nous considérons en particulier les fonctions de Hankel sphériques définies par

$$h_\ell^{(1)}(z) = j_\ell(z) + iy_\ell(z) , \quad (3.154)$$

$$h_\ell^{(2)}(z) = j_\ell(z) - iy_\ell(z) = \overline{h_\ell^{(1)}(z)} \quad \text{pour } z \in \mathbb{R} . \quad (3.155)$$

Les propriétés asymptotiques de ces fonctions sont (exercice) :

$$\begin{aligned} j_\ell(z) &\xrightarrow{z \ll 1} \frac{z^\ell}{(2\ell+1)!} , & j_\ell(z) &\xrightarrow{z \gg 1} \frac{1}{z} \cos(z - (\ell+1)\pi/2) , \\ y_\ell(z) &\xrightarrow{z \ll 1} -\frac{(2\ell-1)!}{z^{\ell+1}} , & y_\ell(z) &\xrightarrow{z \gg 1} \frac{1}{z} \sin(z - (\ell+1)\pi/2) , \\ h_\ell^{(1)}(z) &\xrightarrow{z \ll 1} -i \frac{(2\ell-1)!}{z^{\ell+1}} , & h_\ell^{(1)}(z) &\xrightarrow{z \gg 1} \frac{1}{z} \exp(i[z - (\ell+1)\pi/2]) , \\ h_\ell^{(2)}(z) &\xrightarrow{z \ll 1} i \frac{(2\ell-1)!}{z^{\ell+1}} , & h_\ell^{(2)}(z) &\xrightarrow{z \gg 1} \frac{1}{z} \exp(-i[z - (\ell+1)\pi/2]) . \end{aligned} \quad (3.156)$$

Finalement, l'onde plane admet le développement (exercice) :

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos(\vartheta)) , \quad (3.157)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell \left[h_\ell^{(1)}(kr) + h_\ell^{(2)}(kr) \right] P_\ell(\cos(\vartheta)) . \quad (3.158)$$

Ceci est la décomposition d'une onde plane en ondes partielles à moment cinétique orbitale ℓ fixé. D'après les résultats de la Section 3.1, la solution incidente de Eq. (3.145) est une *onde plane*, et le terme $h_\ell^{(2)}(kr) \propto e^{-ikr}$ pour r grand ne peut pas être modifié (cf. Eq. (3.3) pour $\mathbf{x} = -\hat{\mathbf{k}}r$). La solution asymptotique (pour $r \rightarrow \infty$) est donc de la forme

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell \frac{1}{2} \left[h_\ell^{(2)}(kr) + s_\ell(k) h_\ell^{(1)}(kr) \right] P_\ell(\cos(\vartheta)) \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell \left[j_\ell(kr) + \frac{1}{2} [s_\ell(k) - 1] h_\ell^{(1)}(kr) \right] P_\ell(\cos(\vartheta)) , \end{aligned} \quad (3.159)$$

$$\Psi(\mathbf{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell \frac{1}{2} [s_\ell(k) - 1] h_\ell^{(1)}(kr) P_\ell(\cos(\vartheta)) . \quad (3.160)$$

D'après le comportement asymptotique (3.156), une comparaison avec Eq. (3.3) implique

$$f(k, \vartheta) = -\frac{i}{2k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) [s_\ell(k) - 1] P_\ell(\cos(\vartheta)) . \quad (3.161)$$

Le problème de la diffusion est alors résolu si nous trouvons les fonctions $s_\ell(k)$. Pour $r \rightarrow \infty$, la condition de bord devient

$$R_\ell(r) = \frac{1}{2} \left[h_\ell^{(2)}(kr) + s_\ell(k) h_\ell^{(1)}(kr) \right] \\ \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{2kr} \left[e^{-i(kr - (\ell+1)\pi/2)} + s_\ell(k) e^{i(kr - (\ell+1)\pi/2)} \right]. \quad (3.162)$$

Dans un processus de diffusion élastique dans un potentiel de symétrie sphérique, le moment cinétique orbital \mathbf{L} est conservé. Ainsi, chaque onde partielle à valeur ℓ fixe évolue de manière indépendante (H et \mathbf{L}^2 commutent).

L'onde partielle incidente de moment cinétique ℓ est donnée par $h_\ell^{(2)}(kr)$. D'autre part, l'onde diffusée est donnée asymptotiquement par $s_\ell(k) h_\ell^{(1)}(kr)$. Or, comme le flux doit être conservé, celui de $h_\ell^{(2)}(kr)$ doit coïncider avec celui de $s_\ell(k) h_\ell^{(1)}(kr)$ pour r grand.

Pour une valeur ℓ donnée, le flux de $\Psi_{in} = (2\ell + 1) h_\ell^{(2)}$ à travers une sphère de grand rayon r est donné par

$$F_{in} = -\frac{\hbar}{2im} \lim_{r \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{S}^2(r)} (\Psi_{in}^* \nabla \Psi_{in} - \Psi_{in} \nabla \Psi_{in}^*) \hat{\mathbf{x}} d\Omega \quad (3.163) \\ = -\frac{\hbar}{2im} \lim_{r \rightarrow \infty} 4\pi r^2 \left[\frac{e^{i(kr - (\ell+1)\pi/2)}}{kr} \frac{d}{dr} \frac{e^{-i(kr - (\ell+1)\pi/2)}}{kr} \right. \\ \left. - \frac{e^{-i(kr - (\ell+1)\pi/2)}}{kr} \frac{d}{dr} \frac{e^{+i(kr - (\ell+1)\pi/2)}}{kr} \right], \quad (3.164)$$

ou nous avons utilisé que $\hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla = \frac{d}{dr}$ et

$$\int P_\ell^2(\cos(\vartheta)) \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi = 2\pi \int_{-1}^1 P_\ell^2(\mu) d\mu = 4\pi/(2\ell + 1).$$

D'autre part,

$$F_{out} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\hbar}{2im} \int_{\mathbb{S}^2(r)} (\Psi_{out}^* \nabla \Psi_{out} - \Psi_{out} \nabla \Psi_{out}^*) \hat{\mathbf{x}} d\Omega, \quad (3.165)$$

où $\Psi_{out} = s_\ell(k)(2\ell + 1) h_\ell^{(1)}$. En utilisant la forme asymptotique pour $h_\ell^{(1)}$, on trouve que ceci correspond exactement à l'expression (3.164) à un facteur $|s_\ell(k)|^2$ près. On a donc

$$F_{out} = |s_\ell(k)|^2 F_{in}. \quad (3.166)$$

La conservation du flux de probabilité exige alors

$$s_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell(k)}. \quad (3.167)$$

Ainsi, les éléments $s_\ell(k)$ (de la matrice S) sont déterminés par des nombres réels δ_ℓ , i.e., des déphasages. On peut donner une interprétation intuitive de ces déphasages :

Soit un potentiel U avec $U(r) = 0$ pour $r \geq a$. Alors, pour $r \geq a$, la solution radiale est de la forme

$$R_\ell(r) = \frac{1}{2} e^{i\delta_\ell} \left[e^{-i\delta_\ell} h_\ell^{(2)}(kr) + e^{i\delta_\ell} h_\ell^{(1)}(kr) \right] \quad \text{pour } r \geq a. \quad (3.168)$$

Lorsque $r \rightarrow \infty$, le comportement asymptotique de $h_\ell^{(2)}$ et $h_\ell^{(1)}$ impose

$$\begin{aligned} R_\ell(r) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{2kr} e^{i\delta_\ell} \left[e^{-i(\delta_\ell + kr - (\ell+1)\pi/2)} + e^{i(\delta_\ell + kr - (\ell+1)\pi/2)} \right] \\ &= \frac{e^{i\delta_\ell}}{kr} \sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell) , \end{aligned} \quad (3.169)$$

tandis que l'onde incidente libre est

$$R_\ell(r)^{(\text{libre})} = j_\ell \rightarrow \frac{1}{kr} \sin(kr - \ell\pi/2) . \quad (3.170)$$

L'effet de l'interaction est donc un décalage de la phase de la solution dans la région où l'on peut négliger l'interaction.

Nous utilisons encore ces déphasages pour calculer la section efficace. D'après Eq. (3.161), nous avons

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, \vartheta)|^2 , \quad (3.171)$$

$$= \frac{1}{4k^2} \sum_{\ell, \ell'} (2\ell + 1) (2\ell' + 1) \Xi_{\ell\ell'} P_\ell(\cos(\vartheta)) P_{\ell'}(\cos(\vartheta)) , \quad (3.172)$$

où nous avons posé

$$\begin{aligned} \Xi_{\ell\ell'} &= [s_\ell(k) - 1] [\bar{s}_{\ell'}(k) - 1] , \\ &= (e^{i\delta_\ell} - e^{-i\delta_\ell}) (e^{-i\delta_{\ell'}} - e^{i\delta_{\ell'}}) e^{i\delta_\ell} e^{-i\delta_{\ell'}} , \\ &= 4 \sin(\delta_\ell) \sin(\delta_{\ell'}) e^{i(\delta_\ell - \delta_{\ell'})} . \end{aligned} \quad (3.173)$$

Comme la somme est symétrique en ℓ et ℓ' , nous pouvons symétriser le dernier terme $e^{i(\delta_\ell - \delta_{\ell'})}$ en $\frac{1}{2} [e^{i(\delta_\ell - \delta_{\ell'})} + e^{-i(\delta_\ell - \delta_{\ell'})}] = \cos(\delta_\ell - \delta_{\ell'})$, tel que

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{k^2} \sum_{\ell, \ell'} (2\ell + 1) (2\ell' + 1) \sin(\delta_\ell) \sin(\delta_{\ell'}) \cos(\delta_\ell - \delta_{\ell'}) \\ &\quad \times P_\ell(\cos(\vartheta)) P_{\ell'}(\cos(\vartheta)) . \end{aligned} \quad (3.174)$$

Si le potentiel est de courte portée (a est petit), seuls les premiers termes contribuent à la somme Eq. (3.174). En effet, supposons que le potentiel puisse être négligé pour $r \geq a$; alors, pour $r > a$, l'énergie totale d'une particule est l'énergie cinétique, $E_k = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$, qui doit être plus grande que ou égale à l'énergie due au mouvement orbital, $E_\ell = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}$. Alors, $E_k > E_\ell$ implique $(ka)^2 > \ell(\ell+1)$ et donc $\ell < ka$.

3.3.6 Le théorème optique (bis)

En intégrant Eq. (3.174) sur les directions (ϑ, φ) , nous trouvons

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin(\delta_\ell)^2 = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell , \quad (3.175)$$

où nous avons utilisé l'orthogonalité des polynômes de Legendre,

$$\int P_\ell(\cos(\vartheta)) P_{\ell'}(\cos(\vartheta)) d\Omega = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \delta_{\ell\ell'} . \quad (3.176)$$

D'autre part, d'après Eq. (3.161), on a

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}(f(k, \vartheta)) &= \frac{1}{2k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \operatorname{Re}(1 - s_{\ell}) P_{\ell}(\cos(\vartheta)) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin(\delta_{\ell})^2 P_{\ell}(\cos(\vartheta)) . \end{aligned} \quad (3.177)$$

Comme $P_{\ell}(1) = 1$, Eq. (3.175) implique alors

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}(f(k, 0)) &= \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin(\delta_{\ell})^2 , \\ \sigma &= \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im}(f(k, 0)) . \end{aligned} \quad (3.178)$$

Pour les sections efficaces partielles, nous avons encore

$$\sigma_{\ell} \leq \frac{4\pi}{k} (2\ell + 1) . \quad (3.179)$$

Ceci est appelé la “borne unitaire”, qui n'est atteinte que pour $\delta_{\ell} = (n + 1/2)\pi$.

3.3.7 Résonances

Nous considérons un potentiel de portée finie, i.e., $V(r) = 0$ pour $r \geq a$. Ainsi, pour $r > a$, la solution est alors donnée par

$$\begin{aligned} R_{\ell}(r) &= j_{\ell}(kr) + \frac{1}{2} [s_{\ell}(k) - 1] h_{\ell}^{(1)}(kr) \\ &= e^{i\delta_{\ell}} [j_{\ell}(kr) \cos(\delta_{\ell}) - y_{\ell}(kr) \sin(\delta_{\ell})] . \end{aligned} \quad (3.180)$$

Nous demandons que R_{ℓ} et sa dérivée $R'_{\ell} = \partial_r R_{\ell}$ soient continues en $r = a$. Pour $r < a$, nous dénotons la solution par R_{ℓ}^{\leq} et posons

$$\gamma_{\ell}^{-1} = \frac{a}{R_{\ell}^{\leq}} \left. \frac{dR_{\ell}^{\leq}}{dr} \right|_{r=a} . \quad (3.181)$$

La continuité de R'_{ℓ}/R_{ℓ} donne alors (petit calcul)

$$\tan(\delta_{\ell}) = \frac{ka\gamma_{\ell}(k)j'_{\ell}(ka) - j_{\ell}(ka)}{ka\gamma_{\ell}(k)y'_{\ell}(ka) - y_{\ell}(ka)} . \quad (3.182)$$

A basse énergie, nous avons alors

$$\tan(\delta_{\ell}) \xrightarrow{ka \rightarrow 0} \frac{(2\ell + 1)(ka)^{2\ell+1}}{[(2\ell + 1)!!]^2} \frac{\ell\gamma_{\ell}(k) - 1}{(\ell + 1)\gamma_{\ell}(k) + 1} . \quad (3.183)$$

Donc, en général, le déphasage $\delta_{\ell} \xrightarrow{ka \rightarrow 0} 0$ comme $(ka)^{2\ell+1}$. Mais, s'il existe une énergie $E_0 = \hbar^2 k_0^2 / (2m)$ telle que $\gamma_{\ell}(k_0) = -1/(\ell + 1)$, alors $\tan(\delta_{\ell}(k_0))$ peut diverger. Ceci signifie que $\delta_{\ell}(k) \rightarrow \pi/2$ pour $k \rightarrow k_0$. Dans un voisinage de k_0 , le déphasage peut être approximé par (en général, i.e., s'il n'y a pas de dégénérescence)

$$\tan(\delta_{\ell}(k)) = \frac{\Gamma/2}{E - E_0} . \quad (3.184)$$

On a alors

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \sin^2(\delta_\ell) = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \left[1 + \cot^2(\delta_\ell) \right]^{-1}. \quad (3.185)$$

Au voisinage de la résonance, la section efficace est alors donnée par la *formule de Breit-Wigner*,

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \frac{\Gamma^2/4}{\Gamma^2/4 + (E - E_0)^2} \quad (3.186)$$

où Γ représente la largeur de la résonance et E_0 sa position. Des exemples seront discutés dans les exercices.

Chapitre 4

La théorie de Dirac

L'équation de Schrödinger n'est pas covariante, et ne satisfait donc pas à la relativité restreinte. Pour le cas sans interaction, le principe de correspondance

$$i\hbar\partial_t \leftrightarrow E, \quad -i\hbar\nabla \leftrightarrow \mathbf{p}, \quad (4.1)$$

appliqué à la relation fondamentale de la relativité restreinte, $E^2 - \mathbf{p}^2 c^2 = m^2 c^4$, donne

$$-\hbar^2 (\partial_t^2 - c^2 \Delta) \psi = m^2 c^4 \psi. \quad (4.2)$$

C'est l'équation Klein–Gordon. Chaque composante d'un champs relativiste doit la satisfaire. Cette équation a beaucoup d'auteurs ; par exemple, elle fut aussi trouvée par Schrödinger *avant* son équation de Schrödinger non-relativiste. D'autres auteurs furent W. Pauli, O. Klein, V. Fock, J. Kудay, ...

À quelques exceptions près, toutes les équations de ce chapitre seront écrites en posant

$$\hbar \equiv c \equiv 1. \quad (4.3)$$

Avec ce choix d'unités, nous avons $[t] = \ell$, $[E] = [\mathbf{p}] = [m] = \ell^{-1}$, où ℓ dénote une unité de longueur. La charge électrique est alors sans dimension, $e^2 \simeq 1/137$. D'autre part, ce choix d'unités permet d'écrire Eq. (4.2) sous la forme simplifiée

$$(\partial_t^2 - \Delta) \psi = -m^2 \psi. \quad (4.4)$$

Cette équation admet des solutions en forme d'onde plane,

$$\psi = e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - p_0 t)} \quad \text{avec} \quad p_0^2 = m^2 + \mathbf{p}^2. \quad (4.5)$$

L'énergie associée à ces ondes planes est alors

$$E = p_0 = \pm \sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2}. \quad (4.6)$$

Le spectre de Eq. (4.4) n'a donc pas de borne inférieure, il n'y a pas d'énergie minimale :

$$E \in (-\infty, -m] \cup [m, +\infty). \quad (4.7)$$

Peut-on ignorer la partie $(-\infty, -m]$ du spectre ?

- ★ Sans interaction, ceci est encore à moitié possible. Toutefois, la restriction à la partie positive du spectre n'est pas invariante sous mouvements translatatoires.

- ★ La prise en compte des interactions (par exemple, avec un champ électromagnétique) engendre des transitions entre les parties positive et négative du spectre.

Réduire l'espace de Hilbert à la partie positive du spectre mène ainsi à d'innombrables difficultés et inconsistances. Comme avec *toute équation d'onde relativiste*, nous retomberons sur ce problème dans notre étude de l'équation de Dirac.

La façon dont Dirac a trouvé son équation n'est pas vraiment logique ; ce fut tout simplement un trait de génie. Dans ce cours, nous n'allons pas suivre son argumentation, mais présentons une approche basée sur l'invariance sous le groupe de Lorentz. Mais avant de dériver certaines propriétés du groupe de Lorentz qui nous seront nécessaires par la suite, nous faisons quelques remarques générales.

Nous allons discuter la résolution de Dirac pour le problème des énergies négatives (la "théorie des trous" de Dirac, 1930). En quelques mots, Dirac suppose que le vide est l'état dans lequel tous les niveaux d'énergie négative sont occupés par des électrons. Une interaction qui augmente l'énergie d'un de ces électrons à une valeur positive correspond à la création d'un électron et d'un trou. Un trou est interprété comme une particule qui possède une masse identique à celle de l'électron, mais dont la charge est de signe opposé : un positron.

Malgré sa beauté et relative simplicité, la théorie des trous de Dirac n'est pas exempte de problèmes :

- La charge du "vide" doit être "renormalisée" à zéro.
- La théorie des trous requiert le *principe d'exclusion de Pauli*. Cette théorie n'est donc pas applicable aux particules de spin entier (bosons).

Le problème est résolu par la "deuxième quantification", où l'on traite le champ ψ de Eq. (4.4) ou le champ de Dirac comme des champs quantiques. Les particules ne sont alors que des excitations de ces champs quantiques [9].

Pour l'instant, nous voulons juste retenir que le traitement relativiste de la mécanique quantique rend impossible l'étude d'une particule isolée. Il nous mène tout naturellement à l'étude simultanée de toutes les particules, soit dans le cadre de la "théorie des trous", soit par la "deuxième quantification". De plus, particule et anti-particule sont des manifestations différentes du même champ. La notion de "particule" ne devient claire que dans le cadre de la théorie quantique des champs. En effet, dans le cadre de la mécanique quantique non-relativiste, la quantification (e.g., de la charge ou de la masse) reste un miracle (réduction d'un paquet d'ondes).

Notation :

$$\begin{array}{ll}
 g_{\mu\nu} \equiv \text{diag}(+1, -1, -1, -1) & \mu = 0, 1, 2, 3 \quad k = 1, 2, 3 \\
 x^\mu \equiv (x^0, x^k) \equiv (ct, \mathbf{x}) & x_\mu \equiv g_{\mu\nu} x^\nu \equiv (x^0, -\mathbf{x}) \\
 p^\mu \equiv (p^0, p^k) \equiv (E/c, \mathbf{p}) & p_\mu \equiv g_{\mu\nu} p^\nu \equiv (E/c, -\mathbf{p}) \\
 \nabla \equiv (\partial_{x^1}, \partial_{x^2}, \partial_{x^3}) & \Delta \equiv \nabla \cdot \nabla \\
 \partial_\mu \equiv \partial_{x^\mu} \equiv (c^{-1} \partial_t, \nabla) & \partial^\mu \equiv g^{\mu\nu} \partial_\nu \equiv (c^{-1} \partial_t, -\nabla) \\
 \square \equiv \partial_\mu \partial^\mu \equiv \partial^\mu \partial_\mu \equiv \partial_{x^0}^2 - \Delta
 \end{array}$$

4.1 Rappel sur le groupe de Lorentz

Nous commençons par rappeler quelques propriétés du groupe de Lorentz, $\mathcal{L} \equiv O(1, 3)$, et son algèbre de Lie, $so(1, 3)$.

Soit g le tenseur métrique fondamental,

$$g = (g_{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

Le groupe de Lorentz est défini par

$$\mathcal{L} = \{ \Lambda \in \mathbb{R}^{4 \times 4} \mid \Lambda g \Lambda^T = g \}. \quad (4.9)$$

Il suit que $(\det(\Lambda))^2 = 1 \forall \Lambda \in \mathcal{L}$, donc $\det(\Lambda) = \pm 1$. Comme exemples de matrices Λ avec $\det(\Lambda) = -1$, nous avons les opérateurs \mathcal{P} et \mathcal{T} :

$$\mathcal{P} := \text{diag}(+1, -1, -1, -1) \quad : \text{renversement de l'espace } (\equiv \text{parité}), \quad (4.10)$$

$$\mathcal{T} := \text{diag}(-1, +1, +1, +1) \quad : \text{renversement du temps}. \quad (4.11)$$

Les transformations de Lorentz Λ avec $\det(\Lambda) = +1$ forment le sous-groupe

$$\mathcal{L}_+ = SO(1, 3) \subseteq \mathcal{L}, \quad (4.12)$$

C'est un groupe pseudo-orthogonal. La définition $\Lambda g \Lambda^T = g$ implique que les matrices de Lorentz $\Lambda^\mu{}_\nu$ laissent invariant le produit scalaire de Minkowski,

$$(x, y) = x^T g y = x^0 y^0 - \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = x^0 y^0 - x^1 y^1 - x^2 y^2 - x^3 y^3 = (\Lambda x, \Lambda y). \quad (4.13)$$

La forme bilinéaire (\cdot, \cdot) est symétrique et non-dégénérée.

En plus, lignes et colonnes d'une matrice de Lorentz $\Lambda^\mu{}_\nu$ forment eux mêmes des vecteurs orthonormés par rapport à ce produit scalaire : La condition d'appartenance au groupe de Lorentz, $\Lambda g \Lambda^T = g$, implique

$$\Lambda^0{}_\mu \Lambda^0{}_\nu - \sum_{j=1}^3 \Lambda^j{}_\mu \Lambda^j{}_\nu = \begin{cases} 0 & \text{si } \mu \neq \nu, \\ +1 & \text{si } \mu = \nu = 0, \\ -1 & \text{si } \mu = \nu \neq 0. \end{cases} \quad (4.14)$$

Dans le cas $\mu = \nu = 0$, cela implique $(\Lambda^0{}_0)^2 \geq 1$, i.e.,

$$\Lambda^0{}_0 \geq 1 \quad \text{ou} \quad \Lambda^0{}_0 \leq -1. \quad (4.15)$$

Pour $\Lambda^0{}_0 \geq 1$, la transformation conserve le sens des vecteurs du genre temps, i.e., le signe de la composante temporelle de ces vecteurs ; la transformation est alors qualifiée d'orthochrone. Le groupe de Lorentz orthochrone spécial,

$$\mathcal{L}_+^\dagger = \{ \Lambda \in \mathcal{L}_+ \mid \Lambda^0{}_0 \geq 1 \}, \quad (4.16)$$

est constitué de toutes les transformations de Lorentz qui transforment le cône de lumière positif ($t \geq 0$) en lui-même et qui ont déterminant +1. Ce sous-groupe normal de \mathcal{L} représente la composante (topologique) de l'unité. Notons encore

que seul \mathcal{L}_+^\uparrow est une symétrie respectée par toutes les interaction physiques, tandis que la parité \mathcal{P} et le renversement du temps \mathcal{T} ne sont pas conservés dans les interactions faibles.

Le groupe de Lorentz consiste de quatre nappes disjointes :

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_+^\uparrow \cup \mathcal{P}\mathcal{L}_+^\uparrow \cup \mathcal{T}\mathcal{L}_+^\uparrow \cup \mathcal{TP}\mathcal{L}_+^\uparrow . \quad (4.17)$$

Souvent, on utilise la notation

$$\mathcal{P}\mathcal{L}_+^\uparrow \equiv \mathcal{L}_-^\uparrow , \quad \mathcal{T}\mathcal{L}_+^\uparrow \equiv \mathcal{L}_-^\downarrow , \quad \mathcal{TP}\mathcal{L}_+^\uparrow \equiv \mathcal{L}_+^\downarrow , \quad (4.18)$$

où les signes $\uparrow\downarrow$ indiquent l'orientation temporelle, et les indices \pm indique les signes du déterminant. Evidemment, les ensembles \mathcal{L}_+^\uparrow , $\mathcal{L}_+^\uparrow \cup \mathcal{P}\mathcal{L}_+^\uparrow$, $\mathcal{L}_+^\uparrow \cup \mathcal{T}\mathcal{L}_+^\uparrow$ et $\mathcal{L}_+^\uparrow \cup \mathcal{TP}\mathcal{L}_+^\uparrow$ sont des sous-groupes de \mathcal{L} .

Abréviation	$\det(\Lambda^\mu_\nu)$	Λ^0_0	Désignation du groupe
\mathcal{L}_+^\uparrow	+1	$\geq +1$	propre
$\mathcal{L}_-^\uparrow \equiv \mathcal{P}\mathcal{L}_+^\uparrow$	-1	$\geq +1$	orthochrone
$\mathcal{L}_-^\downarrow \equiv \mathcal{T}\mathcal{L}_+^\uparrow$	-1	≤ -1	complet
$\mathcal{L}_+^\downarrow \equiv \mathcal{TP}\mathcal{L}_+^\uparrow$	+1	≤ -1	

TAB. 4.1 – Propriétés des quatre nappes du groupe complet de Lorentz \mathcal{L} .

Sous-groupes de \mathcal{L}_+^\uparrow

Le groupe des rotations $SO(3)$ est immergé dans \mathcal{L} comme suit. Tout d'abord, nous assumons qu'une matrice de Lorentz $\Lambda \in \mathcal{L}_+^\uparrow$ soit de la forme

$$\Lambda(R) \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R \end{pmatrix} , \quad (4.19)$$

où R est une matrice 3×3 à coefficients réels. La condition $\Lambda g \Lambda^T = g$ requiert alors $RR^T = \mathbb{I}_3$, ce qui signifie que $R \in O(3)$. Comme $\det(\Lambda) = +1$, R est une rotation tri-dimensionnelle, $R \in SO(3)$.

Un autre sous-groupe de \mathcal{L}_+^\uparrow est constitué des "boost" de Lorentz. Par exemple, un boost dans la direction \mathbf{e}_1 correspond à une transformation de Lorentz de la forme

$$\Lambda_1(\chi) := \begin{pmatrix} \cosh(\chi) & \sinh(\chi) & 0 & 0 \\ \sinh(\chi) & \cosh(\chi) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} , \quad (4.20)$$

où $\chi \in \mathbb{R}$ et $v/c = -\tanh(\chi)$. Les boosts en direction \mathbf{e}_1 forment un sous-groupe à un paramètre de \mathcal{L}_+^\uparrow avec générateur

$$K_1 := \left. \frac{d}{d\chi} \Lambda_1(\chi) \right|_{\chi=0} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \quad (4.21)$$

Proposition 4.1.1 *Toute transformation de Lorentz propre, $\Lambda \in \mathcal{L}_+^\uparrow$, peut être représentée sous la forme*

$$\Lambda = \Lambda(R_1)\Lambda_1(\chi)\Lambda(R_2) , \quad (4.22)$$

pour des rotations $R_1, R_2 \in SO(3)$ avec $\Lambda(R)$ donnée par Eq. (4.19) et $\chi \in \mathbb{R}$.

Preuve :

Ce résultat est une conséquence du Lemme 4.2.1 et du fait que \mathcal{L}_+^\uparrow est localement isomorphe à $SL(2, \mathbb{C})$. (cf. plus loin) ■

(La représentation (4.22) n'est pas unique.) Puisque les rotations R_1 et R_2 peuvent être déformées de manière continue en l'unité, et le boost $\Lambda(\chi)$ aussi ($\chi \rightarrow 0$), le groupe de Lorentz propre, \mathcal{L}_+^\uparrow , est connexe.

Proposition 4.1.2 *Soit $\Lambda(\alpha)$ un sous-groupe de \mathcal{L} à un paramètre α avec générateur $M = \frac{d}{d\alpha}\Lambda(\alpha)|_{\alpha=0}$. Alors on a $gM + M^Tg = 0$.*

Preuve :

Comme $\mathcal{L} = \{\Lambda \in \mathbb{R}^{4 \times 4} \mid \Lambda^T g \Lambda = g\}$ et $\Lambda(0) = 0$, nous avons

$$0 = \frac{dg}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} = \frac{d}{d\alpha} [\Lambda^T(\alpha)g\Lambda(\alpha)] \Big|_{\alpha=0} = M^Tg + gM .$$

■

De cette proposition, il suit que les matrices

$$\{M \in \mathbb{R}^{4 \times 4} \mid M^Tg + gM = 0\} \equiv so(1, 3) , \quad (4.23)$$

forment l'algèbre de Lie de \mathcal{L}_+^\uparrow (et de \mathcal{L}). La base usuelle de $so(1, 3)$ est

$$L_j \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_j \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \begin{cases} (I_j)_{lm} = -\epsilon_{jlm} , \\ j, l, m \in \{1, 2, 3\} . \end{cases} \quad (4.24)$$

et

$$K_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad K_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad K_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \quad (4.25)$$

Les I_j sont les générateurs des rotations autour des axes e_j , et les K_j sont les générateurs des boost dans la direction e_j . Il est alors facile de vérifier les relations de commutation suivantes :

$$[L_j, L_k] = \epsilon_{jkl}L_l , \quad [K_j, K_k] = -\epsilon_{jkl}L_l , \quad [K_j, L_k] = \epsilon_{jkl}K_l . \quad (4.26)$$

4.2 Le groupe de Lorentz de la mécanique quantique

Dans la Section 1.4, nous avons démontré que $SU(2)$ est le recouvrement universel de $SO(3)$, raison pour laquelle $SU(2)$ est parfois appelé le “groupe de rotation de la mécanique quantique”. De manière similaire, le groupe de symétrie relevant pour la mécanique quantique relativiste est le recouvrement universel du groupe de Lorentz. (Une *représentation projective* du groupe de Lorentz correspond à une représentation ordinaire de son recouvrement universel.)

Soit

$$SL(2, \mathbb{C}) = \{A \in \mathbb{C}^{2 \times 2} \mid \det(A) = 1\} . \quad (4.27)$$

Dans ce paragraphe, nous démontrons que $SL(2, \mathbb{C})$ est le recouvrement universel du groupe de Lorentz orthochrone spécial, \mathcal{L}_+^\uparrow . Pour ceci, nous devons démontrer que

- a) \mathcal{L}_+^\uparrow est localement isomorphe à $SL(2, \mathbb{C})$. C’est-à-dire, il existe un homomorphisme continu $\Pi : SL(2, \mathbb{C}) \rightarrow \mathcal{L}_+^\uparrow$, tel que
 - Π est surjectif.
 - $\ker(\Pi)$ est discret.
- b) $SL(2, \mathbb{C})$ est simplement connexe.

a) \mathcal{L}_+^\uparrow est localement isomorphe à $SL(2, \mathbb{C})$

Puisque $SO(3)$ est sous-groupe de \mathcal{L}_+^\uparrow et $SU(2)$ est un sous-groupe de $SL(2, \mathbb{C})$, nous procédons de manière similaire à la construction de l’homomorphisme entre $SO(3)$ et $SU(2)$.

Tout d’abord, la représentation spinorielle de $SO(3)$ est étendue à quatre dimensions. Pour cela, nous suppléons les trois matrices de Pauli $(\sigma_k)_{k=1}^3$,

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

avec la matrice unité $\sigma_0 = \mathbb{I}_2 \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$,

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Pour $x = (x^\mu) \in \mathbb{R}^4$, nous considérons maintenant l’application

$$\begin{aligned} \sim : \mathbb{R}^4 &\rightarrow \mathbb{C}^{2 \times 2} \\ x &\mapsto \tilde{x} = x^\mu \sigma_\mu = \begin{pmatrix} x^0 + x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & x^0 - x^3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

La matrice \tilde{x} est hermitienne ($\tilde{x}^* := \overline{(\tilde{x}^T)} = \tilde{x}$) et de trace $\text{tr}(\tilde{x}) = 2x^0$. De plus, $\det(\tilde{x}) = (x^0)^2 - \mathbf{x}^2 = x^\mu x_\mu$, où nous avons posé $x_\mu := g_{\mu\nu} x^\nu$. Toute matrice $X \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ hermitienne se laisse représenter sous la forme $X = \tilde{x}$.

Nous appliquons maintenant une transformation $A \in SL(2, \mathbb{C})$ sur \tilde{x} de manière à obtenir une nouvelle matrice X' ,

$$X' = A\tilde{x}A^*. \quad (4.31)$$

Comme \tilde{x} est hermitienne, il doit en être de même pour X' . Ceci implique qu'il existe un $x' \in \mathbb{R}^4$ tel que

$$\tilde{x}' = X' = A\tilde{x}A^* . \quad (4.32)$$

De plus, $\det(\tilde{x}') = \det(A) \det(\tilde{x}) \det(A^*) = \det(\tilde{x})$ puisque $\det(A) = 1$ par définition ($A \in SL(2, \mathbb{C})$). Ainsi, nous avons $(x'^0)^2 - \mathbf{x}'^2 = (x^0)^2 - \mathbf{x}^2$, ce qui revient à dire que x et x' sont reliés par une transformation de Lorentz $\Lambda(A)$,

$$\Lambda(A) : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^4 \quad (4.33)$$

$$x \mapsto x' .$$

De plus, les éléments de la matrice $\Lambda(A)$ sont des polynômes de deuxième ordre dans les éléments de la matrice A , donc $A \mapsto \Lambda(A)$ est continue. Comme nous le verrons plus bas, $SL(2, \mathbb{C})$ est connexe. Il s'ensuit donc que $\Lambda(A) \in \mathcal{L}_+^\uparrow$ puisque c'est la composante connexe de \mathcal{L} qui contient l'identité.

Ainsi, nous avons défini un homomorphisme continu

$$\Pi : SL(2, \mathbb{C}) \rightarrow \mathcal{L}_+^\uparrow \quad (4.34)$$

$$A \mapsto \Lambda(A) .$$

Evidamment, Π est un homomorphisme de groupe :

$$\Lambda(\widetilde{AB})x = AB\tilde{x}(AB)^* = AB\tilde{x}B^*A^* = A\Lambda(\widetilde{B})xA^* = \Lambda(A)\Lambda(\widetilde{B})x , \quad (4.35)$$

ce qui implique $\Lambda(AB) = \Lambda(A)\Lambda(B)$.

Nous démontrons maintenant que Π est surjectif. Tout d'abord, nous remarquons que $\Pi|_{SU(2)}$ est l'homomorphisme de $SU(2) \rightarrow SO(3)$ du Chapitre 1. En effet, pour $A \in SU(2)$, nous avons $2x'^0 = \text{tr}(\tilde{x}') = \text{Tr}(A\tilde{x}A^*) = \text{Tr}(A^*A\tilde{x}) = \text{Tr}(\tilde{x}) = 2x^0$. De plus, l'image de $\begin{pmatrix} e^{-\chi/2} & 0 \\ 0 & e^{\chi/2} \end{pmatrix}$ est le boost dans la direction \mathbf{e}_3 , i.e.,

$$\Lambda(\chi) = \begin{pmatrix} \cosh(\chi) & 0 & 0 & -\sinh(\chi) \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\sinh(\chi) & 0 & 0 & \cosh(\chi) \end{pmatrix} . \quad (4.36)$$

Un boost dans une direction quelconque est de la forme

$$\Lambda(R)\Lambda(\chi)\Lambda(R^{-1}) = \Lambda \left(A(R) \begin{pmatrix} e^{-\chi/2} & 0 \\ 0 & e^{\chi/2} \end{pmatrix} A(R)^{-1} \right) . \quad (4.37)$$

Alors tous les boosts et toutes les rotations sont dans l'image de Π et, comme ceux-ci génèrent tout \mathcal{L}_+^\uparrow , il s'ensuit que Π est surjectif.

Le noyau de l'homomorphisme Π est défini par

$$\Pi^{-1}(\mathbb{I}) = \{A \in SL(2, \mathbb{C}) \mid A\tilde{x}A^* = \tilde{x}, \forall x \in \mathbb{R}^4\} . \quad (4.38)$$

Pour $\tilde{x} = \mathbb{I}_2$, il suit que A est unitaire, $A \in SU(2)$. D'après notre discussion du Chapitre 1, ceci implique

$$\Pi^{-1}(\mathbb{I}_4) = \Pi|_{SU(2)}^{-1}(\mathbb{I}_4) = \{\mathbb{I}_2, -\mathbb{I}_2\} . \quad (4.39)$$

Comme le noyau de Π est discret (il consiste de points isolés de $SL(2, \mathbb{C})$) et Π est surjectif, cet homomorphisme est un isomorphisme local. En effet, nous avons trouvé que

$$\mathcal{L}_+^\uparrow \cong SL(2, \mathbb{C}) / \{\mathbb{I}_2, -\mathbb{I}_2\} . \quad (4.40)$$

b) $SL(2, \mathbb{C})$ est simplement connexe

Pour démontrer que $SL(2, \mathbb{C})$ est le recouvrement universel de \mathcal{L}_+^\uparrow , il faut encore se convaincre que $SL(2, \mathbb{C})$ est simplement connexe. Pour ceci, nous utilisons la décomposition polaire.

Définition 4.2.1 Une matrice hermitienne $H \in \mathbb{C}^{n \times n}$ est dite positive si pour tout $v \in \mathbb{C}^n$, on a $(v, Hv) > 0$ si $v \neq 0$.

Lemme 4.2.1 (Décomposition polaire) Toute matrice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ non-singulière, i.e., $\det(A) \neq 0$, peut être représentée sous la forme $A = UH$, où U est unitaire et H est hermitienne et positive. Cette décomposition est unique.

Preuve :

Soit A une matrice non-singulière. Alors, la combinaison A^*A est une matrice hermitienne puisque $(A^*A)^* = A^*(A^*)^* = A^*A$. De plus, elle est positive puisque nous avons $(A^*Av, v) = (Av, Av) = \|Av\|^2 > 0$ si $v \neq 0$ et A est non-singulière.

Nous posons ¹ $H = \sqrt{A^*A}$ et $U = AH^{-1}$. Ceci implique

$$\begin{aligned} UU^* &= AH^{-1}(H^{-1})^*A^* = AH^{-2}A^* \\ &= A(A^*A)^{-1}A^* = AA^{-1}(A^*)^{-1}A = \mathbb{I}. \end{aligned}$$

Donc $UH = A$ est une décomposition polaire de A . De plus, elle est unique. En effet, supposons que $U'H' = A$ soit une autre décomposition polaire, alors

$$H^2 = A^*A = (H')^*(U')^*U'H' = (H')\mathbb{I}H' = H'^2,$$

ce qui implique $H' = H$, et donc $U' = U$. ■

Soit maintenant $A \in SL(2, \mathbb{C})$. Nous avons $1 = \det(A) = \det(U)\det(H)$. Comme $\det(H) \in \mathbb{R}_+$ et $|\det(U)| = 1$, nous pouvons conclure que $\det(U) = 1 = \det(H)$. Ainsi, $U \in SU(2)$ et H peut être écrit sous la forme

$$H = V \begin{pmatrix} e^{\chi/2} & 0 \\ 0 & e^{-\chi/2} \end{pmatrix} V^{-1}, \quad (4.41)$$

pour V unitaire. On peut même choisir $V \in SU(2)$, tel que $\Lambda(A) = \Lambda(U)\Lambda(H)$. Ici $\Lambda(U) \in SO(3)$ et $\Lambda(H) = \Lambda(V)\Lambda_3(\chi)\Lambda(V)^{-1}$ où $\Lambda(V) \in SO(3)$, donc $\Lambda(H)$ est un boost dans la direction $\Lambda(V)e_3$.

¹Soit $\lambda_1^2, \lambda_2^2, \dots, \lambda_n^2$, $\lambda_i \in \mathbb{R}_+$ les valeurs propres de A^*A . Alors il existe une matrice S unitaire telle que

$$A^*A = S^* \begin{pmatrix} \lambda_1^2 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \lambda_n^2 \end{pmatrix} S.$$

En posant

$$H = S^* \begin{pmatrix} \lambda_1 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix} S,$$

ceci implique immédiatement $A^*A = H^2$, donc $H = \sqrt{A^*A}$.

Ceci démontre que toute transformation de Lorentz $\Lambda \in \mathcal{L}_+^\uparrow$ peut être décomposée en une rotation et un boost (dans une direction quelconque). L'ensemble des matrices hermitiennes positives de déterminant +1 se laisse paramétriser comme

$$H = h_0 \mathbb{I}_2 + \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} h_0^2 - \|\mathbf{h}\|^2 = 1, \\ h_0 = +\sqrt{1 + \|\mathbf{h}\|^2}. \end{cases} \quad (4.42)$$

Ici, le choix du signe + devant la racine assure que $H > 0$ (exercice). L'ensemble des matrices 2×2 hermitiennes, positives est alors homéomorphe à \mathbb{R}^3 . Donc $SL(2, \mathbb{C})$ est homéomorphe à $SU(2) \times \mathbb{R}^3$ et comme $SU(2)$ et \mathbb{R}^3 sont simplement connexes, $SL(2, \mathbb{C})$ l'est aussi. Plus précisément, comme $SU(2)$ est homéomorphe à \mathbb{S}^3 , $SL(2, \mathbb{C})$ est homéomorphe à $\mathbb{S}^3 \times \mathbb{R}^3$. Le premier facteur correspond aux rotations et le deuxième aux boosts. Ceci termine notre démonstration que $SL(2, \mathbb{C})$ est le recouvrement universel de \mathcal{L}_+^\uparrow .

Les représentations projectives de \mathcal{L}_+^\uparrow correspondent donc aux représentations ordinaires de $SL(2, \mathbb{C})$. Une représentation de $SL(2, \mathbb{C}) : A \mapsto \mathcal{D}(A)$ induit une représentation ordinaire de \mathcal{L}_+^\uparrow si, et seulement si, $\mathcal{D}(-\mathbb{I}_2) = \mathbb{I}_2$.

Algèbre de Lie

L'algèbre de lie de $SL(2, \mathbb{C})$ est (exercice)

$$sl(2, \mathbb{C}) = \{A \in \mathbb{C}^{2 \times 2} \mid \text{tr}(A) = 0\}. \quad (4.43)$$

Comme espace vectoriel sur \mathbb{R} , $\mathbb{C}^{2 \times 2}$ est 8-dimensionnel. Or, comme $\text{tr}(A) = 0$, il suit que $\text{Re}(\text{tr}(A)) = 0$ et $\text{Im}(\text{tr}(A)) = 0$, ce qui correspond à deux conditions et donc l'algèbre de Lie $sl(2, \mathbb{C})$ est 6-dimensionnelle comme espace vectoriel sur \mathbb{R} .

Les matrices suivantes forment une base de $sl(2, \mathbb{C})$:

$$S_j = \frac{1}{2i} \sigma_j \quad \text{et} \quad N_j = \frac{1}{2} \sigma_j. \quad (4.44)$$

Soit $\Pi_* : sl(2, \mathbb{C}) \rightarrow so(1, 3)$, l'homomorphisme induit par Π . Cela signifie que si $A(\alpha)$ est un sous-groupe à un paramètre de $SL(2, \mathbb{C})$ avec

$$M = \left. \frac{d}{d\alpha} A(\alpha) \right|_{\alpha=0} \in sl(2, \mathbb{C}), \quad \text{on a} \quad \Pi_*(M) := \left. \frac{d}{d\alpha} \Pi(A(\alpha)) \right|_{\alpha=0}. \quad (4.45)$$

Nous voulons déterminer $\Pi_*(S_j)$ et $\Pi_*(N_j)$. Comme $\Pi|_{SU(2)}$ est notre ancien homomorphisme de $SU(2) \rightarrow SO(3)$, nous savons déjà que $\Pi_*(S_j) = L_j$ sont les générateurs des rotations autour de l'axe \mathbf{e}_j . D'autre part, N_3 est le générateur de

$$H(\chi) = \begin{pmatrix} e^{\chi/2} & 0 \\ 0 & e^{-\chi/2} \end{pmatrix}. \quad (4.46)$$

Donc, $\Pi_*(N_3) = K_3$, le générateur des boosts le long de l'axe \mathbf{e}_3 (cf. Eq. (4.25)). De manière similaire, on trouve $\Pi_*(N_j) = K_j$ pour $j = 1, 2$.

4.3 Les représentations de dimension finie de $SL(2, \mathbb{C})$, le calcul des spineurs

Nous voulons déterminer toutes les représentations de dimension finie de $SL(2, \mathbb{C})$. En premier lieu, nous construisons certaines représentations, puis nous démontrons que l'on peut obtenir par cette construction toutes les représentations irréductibles de dimension finie (à des représentations équivalentes près). Notons encore que, comme le groupe de Lorentz $SL(2, \mathbb{C})$ est non-compact, toutes ses représentations de dimension finie sont non-unitaires.

Rappelons que l'homomorphisme $\Pi : SL(2, \mathbb{C}) \rightarrow \mathcal{L}_+^\uparrow : A \mapsto \Lambda(A)$ applique A et $-A$ sur la même transformation de Lorentz. Une représentation de $SL(2, \mathbb{C})$ est donc aussi appelée une "bi-représentation" (ou, plus généralement, une représentation projective) de \mathcal{L}_+^\uparrow .

Eléments de calcul spinoriel

Nous introduisons ici l'algèbre des spineurs [2, 17, 18]. Pour l'instant, nous considérons simplement un espace vectoriel complexe \mathcal{E} de dimension 2 qui est isomorphe à \mathbb{C}^2 après le choix d'une base. Nous considérons \mathcal{E} et ses produits tensoriels, $\mathcal{E}^{\otimes n}$. Les éléments de ces espaces sont appelés des "spineurs de rang n ". Nous définissons la représentation suivante de $SL(2, \mathbb{C})$: soit $u \in \mathcal{E}$ avec composantes $u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$ par rapport à une certaine base, et soit $A \in SL(2, \mathbb{C})$,

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \mapsto A \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}. \quad (4.47)$$

(Notez que cette représentation n'est définie qu'à une équivalence près, car elle dépend du choix de la base. Mais ceci n'a aucune importance pour nous.) Soient e^1, e^2 la base choisie de \mathcal{E} . Nous choisissons alors

$$(e^{\alpha_1} \otimes \dots \otimes e^{\alpha_n})_{\alpha_i \in \{1,2\}}, \quad (4.48)$$

comme base sur $\mathcal{E}^{\otimes n}$. Les composantes, $u_{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ d'un spineur de rang n (élément de $\mathcal{E}^{\otimes n}$) se transforment alors avec $A^{\otimes n}$,

$$u_{\alpha_1 \dots \alpha_n} \mapsto A_{\alpha_1}^{\alpha'_1} \dots A_{\alpha_n}^{\alpha'_n} u_{\alpha'_1 \dots \alpha'_n} \equiv \sum_{\alpha'_1 \dots \alpha'_n} A_{\alpha_1}^{\alpha'_1} \dots A_{\alpha_n}^{\alpha'_n} u_{\alpha'_1 \dots \alpha'_n}. \quad (4.49)$$

Ici nous avons introduit la 'convention de sommation' de Einstein : sur tout les index qui apparaissent deux fois dans une expression la somme est performée sans que nous indiquions ceci par le signe \sum . Nous introduisons encore la notation spinorielle suivante :

Tout spineur à deux composantes se transformant suivant Eq. (4.47) est un spineur de rang 1 et sera noté (u_α) , $\alpha = 1, 2$. Un spineur de rang n est une quantité $(u_{\alpha_1 \dots \alpha_n})$, $\alpha_i = 1, 2$ se transformant suivant Eq. (4.49).

Soient (u_α) et (v_β) deux spineurs qui se transforment suivant Eq. (4.47). Comme une transformation $A \in SL(2, \mathbb{C})$ a $\det(A) = 1$, l'aire du parallélogramme formé par ces deux spineurs est invariante sous A . En effet, pour

$u' = Au$ et $v' = Av$

$$\begin{aligned} u'_1 v'_2 - u'_2 v'_1 &= \det \begin{pmatrix} u'_1 & v'_1 \\ u'_2 & v'_2 \end{pmatrix} = \det(A) \det \begin{pmatrix} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{pmatrix} = u_1 v_2 - u_2 v_1 . \end{aligned} \quad (4.50)$$

L'invariance sous la transformation A de la combinaison $u_1 v_2 - u_2 v_1$ motive l'introduction de spineurs contravariants u^α définis par

$$\boxed{u^1 = u_2 \quad \text{et} \quad u^2 = -u_1} \quad (4.51)$$

Ceci nous permet d'introduire un produit anti-symétrique ,

$$u_\alpha v^\alpha = u_1 v^1 + u_2 v^2 = u_1 v_2 - u_2 v_1 = -u^2 v_2 - u^1 v_1 = -u^\alpha v_\alpha , \quad (4.52)$$

qui correspond à la forme symplectique bilinéaire,

$$\langle u, v \rangle := u_1 v_2 - u_2 v_1 = \det((u, v)) = -\det((v, u)) = -\langle v, u \rangle . \quad (4.53)$$

Comme nous avons pu le vérifier explicitement avec Eq. (4.50), la représentation \mathcal{D} , définie par $\mathcal{D}(A) = A$, laisse invariante cette structure symplectique bilinéaire puisque $\det(A) = 1$ pour $A \in SL(2, \mathbb{C})$, i.e.,

$$\langle Au, Av \rangle = \langle u, v \rangle \quad \text{où} \quad u, v \in \mathcal{E} . \quad (4.54)$$

Dans l'idée d'utiliser le calcul tensoriel, nous introduisons la 2-forme symplectique $\epsilon = (\epsilon_{\alpha\beta})$, donnée par

$$\begin{aligned} \epsilon &= (\epsilon_{\alpha\beta}) = (\epsilon^{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} , \\ \epsilon^T &= \epsilon^{-1} = -\epsilon . \end{aligned} \quad (4.55)$$

Avec ceci, nous avons

$$\langle u, v \rangle = \epsilon^{\alpha\beta} u_\alpha v_\beta = -\langle v, u \rangle . \quad (4.56)$$

La quantité $\epsilon_{\alpha\beta}$ est un élément essentiel de l'algèbre spinorielle. Elle joue un rôle similaire à celui joué par le tenseur métrique dans la théorie tensorielle (riemannienne), mais avec des différences importantes dues à son anti-symétrie. Cette forme spinorielle lie les composantes covariantes et contravariantes par les relations

$$u^\alpha = \epsilon^{\alpha\beta} u_\beta \quad \text{et} \quad u_\beta = u^\alpha \epsilon_{\alpha\beta} = -u^\alpha \epsilon_{\beta\alpha} . \quad (4.57)$$

Cette définition se laisse généraliser facilement sur des spineurs de rang $n > 1$.

Notons encore que Eq. (4.52) implique que tout spineur de rang impair est de norme nulle :

$$u_\alpha u^\alpha = 0 , \quad u_{\alpha\beta\gamma} u^{\alpha\beta\gamma} = 0 , \quad \dots . \quad (4.58)$$

A cause de l'anti-symétrie des matrices ϵ , des précautions doivent être prises pour monter ou descendre les indices spinoriels. Nous choisissons les règles suivantes :

- Si la matrice $\epsilon_{\alpha\beta}$ est utilisée pour **descendre** un indice, la sommation s'effectue sur le **premier** indice, α .
- Si la matrice $\epsilon^{\alpha\beta}$ est utilisée pour **monter** un indice, la sommation s'effectue sur le **deuxième** indice, β .

D'après les relations (4.57), il suit que

$$u^\gamma = u_\beta \epsilon^{\gamma\beta} = u^\alpha \epsilon_{\alpha\beta} \epsilon^{\gamma\beta} \longrightarrow \epsilon_{\alpha\beta} \epsilon^{\gamma\beta} = (\epsilon \cdot \epsilon^T)_\alpha^\gamma = \delta_\alpha^\gamma, \quad (4.59)$$

$$u_\gamma = u^\alpha \epsilon_{\alpha\gamma} = u_\beta \epsilon^{\alpha\beta} \epsilon_{\alpha\gamma} \longrightarrow \epsilon^{\alpha\beta} \epsilon_{\alpha\gamma} = (\epsilon^T \cdot \epsilon)_\gamma^\beta = \delta_\gamma^\beta. \quad (4.60)$$

Si nous considérons ϵ comme spineur de rang 2, ces résultats impliquent que ϵ avec un indice contravariant et l'autre covariant est donné par la forme mixte

$$\epsilon_\alpha{}^\gamma = \delta_\alpha^\gamma = -\epsilon^\gamma{}_\alpha. \quad (4.61)$$

D'après nos conventions, on peut dire que $\epsilon^{\gamma\beta}$ monte le deuxième indice de $\epsilon_{\alpha\beta}$ dans l'équation (4.59); de manière similaire pour Eq. (4.60), $\epsilon_{\alpha\gamma}$ descend le premier indice de $\epsilon^{\alpha\beta}$. Si on collecte toutes ces informations, nous avons, par exemple,

$$\epsilon_\alpha{}^\gamma = \epsilon_{\alpha\beta} \epsilon^{\gamma\beta} = -\epsilon_{\alpha\beta} \epsilon^{\beta\gamma} = \epsilon_{\beta\alpha} \epsilon^{\beta\gamma} = \epsilon^{\beta\gamma} \epsilon_{\beta\alpha} = \epsilon_\alpha{}^\gamma = -\epsilon^\gamma{}_\alpha, \quad (4.62)$$

$$\psi^{\gamma\alpha} = \psi^\gamma{}_\beta \epsilon^{\alpha\beta} = -\psi^\gamma{}_\beta \epsilon^{\beta\alpha} = -\psi^{\gamma\rho} \epsilon_{\rho\beta} \epsilon^{\beta\alpha} = \psi^{\gamma\rho} \epsilon_{\beta\rho} \epsilon^{\beta\alpha} = \psi^{\gamma\rho} \epsilon_\rho{}^\alpha, \quad (4.63)$$

$$\psi^\gamma{}_\beta = \psi^{\gamma\alpha} \epsilon_{\alpha\beta} = -\psi^{\gamma\alpha} \epsilon_{\beta\alpha} = -\psi^{\gamma\rho} \epsilon_{\rho\alpha} \epsilon_{\beta\alpha} = \psi^{\gamma\rho} \epsilon^{\rho\alpha} \epsilon_{\beta\alpha} = \psi^{\gamma\rho} \epsilon_\rho{}^\beta. \quad (4.64)$$

Une dernière règle du calcul spinoriel découle de la forme symplectique bilinéaire, une sorte de identité de Jacobi,

$$\langle u, v \rangle w + \langle v, w \rangle u + \langle w, u \rangle v = 0, \quad \forall u, v, w \in \mathcal{E}. \quad (4.65)$$

En notation spinorielle, cette identité peut être écrite sous diverses formes, entre autres,

$$u_\alpha v^\alpha w^\beta + v_\alpha w^\alpha u^\beta + w_\alpha u^\alpha v^\beta = 0, \quad (4.66)$$

$$\text{ou} \quad [\epsilon_{\alpha\beta} \epsilon_\gamma{}^\rho + \epsilon_{\beta\gamma} \epsilon_\alpha{}^\rho + \epsilon_{\gamma\alpha} \epsilon_\beta{}^\rho] u^\alpha v^\beta w^\gamma = 0. \quad (4.67)$$

De cette dernière équation, nous pouvons extraire

$$\epsilon_{\alpha\beta} \epsilon_\gamma{}^\rho = -\epsilon_{\beta\gamma} \epsilon_\alpha{}^\rho - \epsilon_{\gamma\alpha} \epsilon_\beta{}^\rho, \quad (4.68)$$

$$\epsilon_{\alpha\beta} \epsilon^{\gamma\rho} = -\epsilon_{\beta\gamma} \epsilon_\alpha{}^\rho - \epsilon_{\gamma\alpha} \epsilon_\beta{}^\rho = \epsilon_\alpha{}^\gamma \epsilon_\beta{}^\rho - \epsilon_\beta{}^\gamma \epsilon_\alpha{}^\rho. \quad (4.69)$$

Ceci implique, entre autres, que tous les éléments antisymétriques de $\mathcal{E}^{\otimes 2}$ sont proportionnels à $\epsilon_{\alpha\beta}$. En effet, si $\psi_{\alpha\beta} = -\psi_{\beta\alpha}$, on a d'après (4.69)

$$\psi_\gamma{}^\gamma \epsilon_{\alpha\beta} = \psi_{\gamma\rho} \epsilon_{\alpha\beta} \epsilon^{\gamma\rho} = \psi_{\alpha\beta} - \psi_{\beta\alpha} = 2\psi_{\alpha\beta}. \quad (4.70)$$

Finalement, comme un élément $A \in SL(2, \mathbb{C})$ transforme les composantes de spineurs avec indices covariants, la position de ses indices est $A = (A_\alpha{}^\beta)$.

Les représentations $\mathcal{D}(\frac{1}{2}, 0)$ et $\mathcal{D}(0, \frac{1}{2})$

Pour $SL(2, \mathbb{C})$ la représentation $\mathcal{D} : A \mapsto A \equiv \mathcal{D}(A)$ n'est pas la seule représentation bi-dimensionnelle. Mais $\bar{\mathcal{D}} : A \mapsto \bar{A}$ est une autre représentation inéquivalente comme nous le verrons.

Nous introduisons donc $\dot{\mathcal{E}}$, aussi un espace vectoriel complexe de dimension 2 sur lequel nous définissons la représentation complète conjuguée, $\dot{\mathcal{D}}(A)\dot{u} = \bar{A}\dot{u}$ pour tout $\dot{u} \in \dot{\mathcal{E}}$. Les deux espaces vectoriels, \mathcal{E} et $\dot{\mathcal{E}}$, portent alors les représentations \mathcal{D} et $\dot{\mathcal{D}}$, respectivement. Soient encore $u = (u_\alpha) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \in \mathcal{E}$ et $\dot{u} = (u_{\dot{\alpha}}) = \begin{pmatrix} \dot{u}_1 \\ \dot{u}_2 \end{pmatrix} \in \dot{\mathcal{E}}$. Nous avons alors déjà deux représentations (projectives) du groupe de Lorentz en utilisant le calcul spinoriel :

$$u \mapsto Au \equiv \mathcal{D}(A)u, \quad (4.71)$$

$$\bar{u} \mapsto \bar{A}\bar{u} \equiv \dot{\mathcal{D}}(A)\bar{u}, \quad (4.72)$$

avec $\det(A) = \det(\bar{A}) = 1$. Nous démontrerons que ces deux représentations sont inéquivalentes. Pour des indices covariants, nous avons alors deux sortes de spineur : spineur “sans point” u_α , et spineur “avec point” $u_{\dot{\alpha}}$. Ces spineurs se transforment suivant

$$u_\alpha \mapsto A_\alpha{}^\beta u_\beta \quad (4.73)$$

$$u_{\dot{\alpha}} \mapsto \bar{A}_{\dot{\alpha}}{}^{\dot{\beta}} u_{\dot{\beta}}, \quad (4.74)$$

où nous avons utilisé la notation spinorielle (généralisée) :

Tout spineur à deux composantes se transformant suivant Eq. (4.73) est un spineur de rang 1 et sera noté (u_α) , $\alpha = 1, 2$.

Tout spineur à deux composantes se transformant suivant Eq. (4.74) est un spineur de rang 1 et sera noté $(u_{\dot{\alpha}})$, $\dot{\alpha} = \dot{1}, \dot{2}$.

Dans la section précédente, nous avons dérivé un certain nombre de règles de calcul spinoriel pour des spineurs (u_α) qui se transforment suivant Eq. (4.73). Il est évident que des règles analogues, obtenues par simple substitution, s'appliquent dans le cas de spineurs $(u_{\dot{\alpha}})$ qui se transforment suivant Eq. (4.74) : le complexe conjugué d'une équation spinorielle est obtenu en remplaçant tous les indices sans point par des indices avec point, et *vice versa*. En particulier, nous avons

$$\boxed{\begin{array}{ll} u^\alpha = \epsilon^{\alpha\beta} u_\beta & \text{et} \quad u_\beta = u^\alpha \epsilon_{\alpha\beta} \\ u^{\dot{\alpha}} = \epsilon^{\dot{\alpha}\dot{\beta}} u_{\dot{\beta}} & \text{et} \quad u_{\dot{\beta}} = u^{\dot{\alpha}} \epsilon_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \end{array}} \quad (4.75)$$

où les formes spinorielles sont comme avant

$$\boxed{\begin{array}{l} \epsilon = (\epsilon_{\alpha\beta}) = (\epsilon^{\alpha\beta}) = (\epsilon_{\dot{\alpha}\dot{\beta}}) = (\epsilon^{\dot{\alpha}\dot{\beta}}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\ \epsilon^T = \epsilon^{-1} = -\epsilon \end{array}} \quad (4.76)$$

Les règles pour monter ou descendre les indices spinoriels sont fixées par la position de ces indices.

Pour les deux types de spineurs, les formes symplectiques sont

$$\langle u, v \rangle = u_\beta v^\beta = \epsilon_{\alpha\beta} u^\alpha v^\beta = \epsilon^{\beta\gamma} u_\beta v_\gamma \quad \text{où} \quad u, v \in \mathcal{E}, \quad (4.77)$$

$$\langle \dot{u}, \dot{v} \rangle = u_{\dot{\beta}} v^{\dot{\beta}} = \epsilon_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} u^{\dot{\alpha}} v^{\dot{\beta}} = \epsilon^{\dot{\beta}\dot{\gamma}} u_{\dot{\beta}} v_{\dot{\gamma}} \quad \text{où} \quad \dot{u}, \dot{v} \in \dot{\mathcal{E}}. \quad (4.78)$$

L'invariance de la structure symplectique bilinéaire, Eq. (4.54), se manifeste alors sous la forme (notation : $(u'_\alpha) = (Au)_\alpha = A_\alpha^\gamma u_\gamma$)

$$\begin{aligned} \langle u', v' \rangle &= u'_\beta v'^\beta = \epsilon^{\beta\gamma} u'_\beta v'_\gamma = \epsilon^{\beta\gamma} A_\beta^\rho u_\rho A_\gamma^\sigma v_\sigma = A_\beta^\rho \epsilon^{\beta\gamma} A_\gamma^\sigma u_\rho v_\sigma \\ &= \epsilon^{\rho\sigma} u_\rho v_\sigma = u_\rho v^\rho = \langle u, v \rangle, \end{aligned} \quad (4.79)$$

c'est-à-dire,

$$\langle Au, Av \rangle = A_\beta^\rho \epsilon^{\beta\gamma} A_\gamma^\sigma u_\rho v_\sigma = \epsilon^{\rho\sigma} u_\rho v_\sigma = \langle u, v \rangle, \quad (4.80)$$

$$\langle \bar{A}\dot{u}, \bar{A}\dot{v} \rangle = \bar{A}_\beta^{\dot{\rho}} \epsilon^{\dot{\beta}\dot{\gamma}} \bar{A}_{\dot{\gamma}}^{\dot{\sigma}} u_{\dot{\rho}} v_{\dot{\sigma}} = \epsilon^{\dot{\rho}\dot{\sigma}} u_{\dot{\rho}} v_{\dot{\sigma}} = \langle \dot{u}, \dot{v} \rangle. \quad (4.81)$$

Il s'ensuit que

$$\epsilon^{\rho\sigma} = A_\beta^\rho \epsilon^{\beta\gamma} A_\gamma^\sigma \quad \rightarrow \quad \epsilon = A^T \epsilon A \quad \rightarrow \quad (A^T)^{-1} = \epsilon A \epsilon^{-1}, \quad (4.82)$$

$$\epsilon^{\dot{\rho}\dot{\sigma}} = \bar{A}_\beta^{\dot{\rho}} \epsilon^{\dot{\beta}\dot{\gamma}} \bar{A}_{\dot{\gamma}}^{\dot{\sigma}} \quad \rightarrow \quad \epsilon = \bar{A}^T \epsilon \bar{A} \quad \rightarrow \quad (\bar{A}^T)^{-1} = \epsilon \bar{A} \epsilon^{-1}. \quad (4.83)$$

Ceci implique que ϵ est un spineur invariant sous $\mathcal{D}(A)^{\otimes 2}$ et sous $\dot{\mathcal{D}}(A)^{\otimes 2}$. En plus, si les composantes spinorielles covariantes u_α se transforment avec A par définition, les composantes contravariantes $u^\alpha = \epsilon^{\alpha\beta} u_\beta$ se transforment avec $(A^T)^{-1}$. De même, si les composantes spinorielles covariantes v_α se transforment avec \bar{A} par définition, les composantes contravariantes v^α se transforment avec $(\bar{A}^T)^{-1}$. C'est-à-dire $A \mapsto A$ et $A \mapsto (A^T)^{-1}$ sont des représentations équivalentes de $SL(2, \mathbb{C})$ et, de même pour $A \mapsto \bar{A}$ et $A \mapsto (\bar{A}^T)^{-1} = (A^*)^{-1}$.

Nous pouvons résumer ces informations de la manière suivante :

- ★ Si $A \in SU(2)$, i.e., $A^* = A^{-1}$, nous avons $\bar{A} = \epsilon^{-1} (A^*)^{-1} \epsilon = \epsilon^{-1} A \epsilon$. D'après la discussion du § 1.5, $\mathcal{D}(A)$ et $\mathcal{D}(\bar{A}) = \dot{\mathcal{D}}(A)$ sont alors deux représentations équivalentes. Nous en concluons que, dans $SU(2)$, il n'existe qu'une représentation spinorielle, $\mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$.
- ★ Si $A \in SL(2, \mathbb{C})$ et $A = A^*$, nous avons $\bar{A} = \epsilon^{-1} (A^*)^{-1} \epsilon = \epsilon^{-1} A^{-1} \epsilon$. Pour que \bar{A} soit dans la même classe que A , il faut alors que A^{-1} soit aussi dans la même classe que A . Mais ceci n'est pas le cas pour les matrices hermitiennes positives (exercice).

Alors, $A \mapsto A$ et $A \mapsto \bar{A}$ sont deux représentations inéquivalentes de \mathcal{L}_+^\uparrow ou $SL(2, \mathbb{C})$. Elles sont appelées $\mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 0)}(A)$ et $\mathcal{D}^{(0, \frac{1}{2})}(A)$.

Représentations tensorielles

De nouvelles représentations peuvent être obtenues par produits tensoriels. Nous construisons des représentations tensorielles sur l'espace vectoriel $\mathcal{E}^{\otimes n} \otimes \dot{\mathcal{E}}^{\otimes m}$ comme pour l'avons fait pour $\mathcal{E}^{\otimes n}$.

Les éléments de $\mathcal{E}^{\otimes n} \otimes \dot{\mathcal{E}}^{\otimes m}$ sont les spineurs de rang (n, m) . Pour des bases e^1, e^2 et \dot{e}^1, \dot{e}^2 de \mathcal{E} et $\dot{\mathcal{E}}$, nous choisissons la base

$$\left(e^{\alpha_1} \otimes \dots \otimes e^{\alpha_n} \otimes \dot{e}^{\dot{\beta}_1} \otimes \dots \otimes \dot{e}^{\dot{\beta}_m} \right), \quad \alpha_i \in \{1, 2\} \quad \text{et} \quad \dot{\beta}_j \in \{\dot{1}, \dot{2}\} \quad (4.84)$$

de $\mathcal{E}^{\otimes n} \otimes \dot{\mathcal{E}}^{\otimes m}$. Les composantes d'un élément de $\mathcal{E}^{\otimes n} \otimes \dot{\mathcal{E}}^{\otimes m}$ par rapport à cette base naturelle sont notées $u_{\alpha_1 \dots \alpha_n \dot{\beta}_1 \dots \dot{\beta}_m}$. Elles se transforment avec $(\mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 0)})^{\otimes n} \otimes$

$(\mathcal{D}^{(0, \frac{1}{2})})^{\otimes m}$. En d'autres termes, pour $A = (A_\alpha^\beta)$, l'élément $u \in \mathcal{E}^{\otimes n} \otimes \dot{\mathcal{E}}^{\otimes m}$ se transforme suivant

$$u_{\alpha_1 \dots \alpha_n \dot{\beta}_1 \dots \dot{\beta}_m} \mapsto A_{\alpha_1}^{\alpha'_1} \dots A_{\alpha_n}^{\alpha'_n} \bar{A}_{\dot{\beta}_1}^{\dot{\beta}'_1} \dots \bar{A}_{\dot{\beta}_m}^{\dot{\beta}'_m} u_{\alpha'_1 \dots \alpha'_n \dot{\beta}'_1 \dots \dot{\beta}'_m} . \quad (4.85)$$

Mise à part les cas $(n, m) = (1, 0)$ et $(n, m) = (0, 1)$, cette représentation n'est pas irréductible. Par exemple, sur $\mathcal{E}^{\otimes 2}$, nous pouvons décomposer cette représentation en sa partie symétrique et antisymétrique. Ces deux sous-espaces sont invariants sous la représentation $(\mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 0)})^{\otimes 2}$. En effet, Eq. (4.82) montre que $\epsilon = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathcal{E} \otimes \mathcal{E}$ est un spineur invariant de rang 2 (le seul!).

Par la suite, nous noterons $\mathcal{E}^{(n, m)}$ l'espace des spineurs en $\mathcal{E}^{\otimes n} \otimes \dot{\mathcal{E}}^{\otimes m}$ qui sont totalement symétriques par rapport aux n premiers indices (sans point) et par rapport aux m derniers indices (avec point). La restriction sur $\mathcal{E}^{(n, m)}$ de la représentation $(\mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 0)})^{\otimes n} \otimes (\mathcal{D}^{(0, \frac{1}{2})})^{\otimes m}$ est notée $\mathcal{D}^{(\frac{n}{2}, \frac{m}{2})}$. Sa dimension est

$$\dim \left(\mathcal{D}^{(\frac{n}{2}, \frac{m}{2})} \right) = (n+1)(m+1) . \quad (4.86)$$

La restriction de $\mathcal{D}^{(\frac{n}{2}, \frac{m}{2})}$ sur $SU(2)$ est

$$\mathcal{D}^{(\frac{n}{2}, \frac{m}{2})} \Big|_{SU(2)} \cong \mathcal{D}^{\frac{n}{2}} \otimes \mathcal{D}^{\frac{m}{2}} \cong \bigoplus_{j=|\frac{n}{2}-\frac{m}{2}|}^{|\frac{n}{2}+\frac{m}{2}|} \mathcal{D}^j . \quad (4.87)$$

Un champ qui se transforme avec $\mathcal{D}^{(\frac{n}{2}, \frac{m}{2})}$ sans restriction additionnelle contient donc des particules de tous les spin j avec $|\frac{n}{2} - \frac{m}{2}| \leq j \leq \frac{n}{2} + \frac{m}{2}$. Visualisons cela sur $u_\uparrow \otimes \dots \otimes u_\uparrow \in \mathcal{E}^{\otimes_s n}$, où $u_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. La restriction de $\mathcal{D}^{(\frac{n}{2}, \frac{m}{2})}$ sur $\mathcal{E}^{\otimes_s n}$ est $\mathcal{D}^{(\frac{n}{2}, 0)}$ et on a

$$\begin{aligned} & \left[\left(\mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 0)} \right)^{\otimes n} \right]_* \left(\frac{1}{2i} \sigma_3 \right) u_\uparrow \otimes \dots \otimes u_\uparrow \\ &= \left[\mathcal{D}_*^{(\frac{1}{2}, 0)} \otimes \mathbb{I} \dots \otimes \mathbb{I} \oplus \dots \oplus \mathbb{I} \otimes \dots \otimes \mathcal{D}_*^{(\frac{1}{2}, 0)} \right] \left(\frac{1}{2i} \sigma_3 \right) u_\uparrow \otimes \dots \otimes u_\uparrow \\ &= \frac{n}{2i} u_\uparrow \otimes \dots \otimes u_\uparrow . \end{aligned} \quad (4.88)$$

Donc, $\mathcal{D}^{(\frac{n}{2}, \frac{m}{2})} \Big|_{SU(2)}$ contient $\mathcal{D}^{\frac{n}{2}}$ sur le premier facteur, mais $\dim(\mathcal{D}^{\frac{n}{2}}) = n+1$, ce qui est aussi la dimension de $\mathcal{E}^{\otimes_s n}$. On procède de même avec $\dot{\mathcal{E}}^{\otimes_s m}$.

Pour $A \in SU(2)$, nous avons $\bar{A} = \epsilon^{-1} A \epsilon$, donc

$$\mathcal{D}^{(0, \frac{1}{2})} \Big|_{SU(2)} \cong \mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 0)} \cong \mathcal{D}^{\frac{1}{2}} , \quad (4.89)$$

$$\mathcal{D}^{(0, \frac{m}{2})} \Big|_{SU(2)} \cong \mathcal{D}^{(\frac{m}{2}, 0)} \Big|_{SU(2)} \cong \mathcal{D}^{\frac{m}{2}} . \quad (4.90)$$

4.3.1 Irréductibilité et complétude des rep. $\mathcal{D}^{(\frac{n}{2}, \frac{m}{2})}$

Nous démontrons maintenant que les représentations $\mathcal{D}^{(n, m)}$ sont irréductibles, et que l'ensemble des $\mathcal{D}^{(n, m)} = \{ \mathcal{D}^{(\frac{n}{2}, \frac{m}{2})} \mid n, m \in \mathbb{N} \}$ contient toutes les représentations irréductibles de $SL(2, \mathbb{C})$ de dimension finie (à des représentations équivalentes près).

Pour démontrer les propriétés d'irréductibilité et de complétude, nous considérons les groupes $SL(2, \mathbb{C})$ et $SU(2) \times SU(2)$. Nous choisissons les bases des algèbres de Lie $sl(2, \mathbb{C})$ et $su(2) \oplus su(2)$, respectivement.

$$su(2) \oplus su(2) : \quad M_j := \frac{1}{2i} \sigma_j \oplus 0, \quad N_j := 0 \oplus \frac{1}{2i} \sigma_j, \quad (4.91)$$

$$sl(2, \mathbb{C}) : \quad I_j := \frac{1}{2i} \sigma_j, \quad K_j := \frac{1}{2} \sigma_j. \quad (4.92)$$

Avec la relation $[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\epsilon_{jkl}\sigma_l$, ceux-ci satisfont aux relations de commutation

$$\begin{aligned} [M_j, M_k] &= \epsilon_{jkl} M_l, & [N_j, N_k] &= \epsilon_{jkl} N_l, & [M_j, N_k] &= 0, \\ [I_j, I_k] &= \epsilon_{jkl} I_l, & [K_j, K_k] &= -\epsilon_{jkl} I_l, & [K_j, I_k] &= \epsilon_{jkl} K_l. \end{aligned} \quad (4.93)$$

Nous considérons alors une représentation \mathcal{D} quelconque de $SL(2, \mathbb{C})$ sur un espace vectoriel \mathcal{E} de dimension finie. La représentation induite de $sl(2, \mathbb{C})$ est indiquée par \mathcal{D}_* . Nous définissons la représentation $\tilde{\mathcal{D}}_*$ sur $su(2) \oplus su(2)$ par

$$\tilde{\mathcal{D}}_*(M_j) := \frac{1}{2} [\mathcal{D}_*(I_j) - i\mathcal{D}_*(K_j)], \quad (4.94)$$

$$\tilde{\mathcal{D}}_*(N_j) := \frac{1}{2} [\mathcal{D}_*(I_j) + i\mathcal{D}_*(K_j)]. \quad (4.95)$$

Les $\tilde{\mathcal{D}}_*(M_j)$ et $\tilde{\mathcal{D}}_*(N_j)$ satisfont aux mêmes relations de commutation que les M_j et N_j , et ils définissent alors bien une représentation de $su(2) \oplus su(2)$.

Comme $SU(2) \times SU(2)$ est simplement connexe, $\tilde{\mathcal{D}}_*$ peut être intégré à une représentation $\tilde{\mathcal{D}}$ du groupe $SU(2) \times SU(2)$. En effet, tout élément $(g_1, g_2) \in SU(2) \times SU(2)$ se laisse représenter sous la forme $(g_1, g_2) = (e^{A_1}, e^{A_2})$ pour $(A_1, A_2) \in su(2) \oplus su(2)$. Nous définissons alors $\tilde{\mathcal{D}}(g_1, g_2) = (e^{\tilde{\mathcal{D}}_*(A_1)}, e^{\tilde{\mathcal{D}}_*(A_2)})$. Inversement, pour toute représentation $\tilde{\mathcal{D}}$ de $SU(2) \times SU(2)$, nous définissons

$$\mathcal{D}_*(I_j) := \tilde{\mathcal{D}}_*(M_j) + \tilde{\mathcal{D}}_*(N_j), \quad (4.96)$$

$$\mathcal{D}_*(K_j) := i [\tilde{\mathcal{D}}_*(M_j) - \tilde{\mathcal{D}}_*(N_j)]. \quad (4.97)$$

Les $\mathcal{D}_*(I_j)$ et $\mathcal{D}_*(K_j)$ satisfont les mêmes relations de commutation que les I_j et K_j , et ils forment ainsi une représentation de ces dernières. Comme aussi $SL(2, \mathbb{C})$ est simplement connexe, \mathcal{D}_* peut être intégrée à une représentation de $SL(2, \mathbb{C})$.

Nous avons alors une relation bijective entre les représentations de $SL(2, \mathbb{C})$ et de $SU(2) \times SU(2)$. Si la représentation \mathcal{D} de $SL(2, \mathbb{C})$ est irréductible, ceci est aussi le cas pour $\tilde{\mathcal{D}}$, et vice-versa. Or, nous connaissons les représentations irréductibles de $SU(2) \times SU(2)$. Ce sont les représentations

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{j_1} \times \mathcal{D}^{j_2} : SU(2) \times SU(2) &\rightarrow \text{iso}(\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2) \\ (g_1, g_2) &\mapsto \mathcal{D}^{j_1}(g_1) \otimes \mathcal{D}^{j_2}(g_2), \end{aligned} \quad (4.98)$$

pour $j_1, j_2 \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \dots\}$.

Théorème 4.3.1 *La représentation $\mathcal{D}^{j_1} \times \mathcal{D}^{j_2}$ de $SU(2) \times SU(2)$ est associée (par la relation bijective définie par Eqs. (4.94)–(4.97)) à une représentation de $SL(2, \mathbb{C})$ qui est isomorphe à $\mathcal{D}^{(j_1, j_2)}$ sur l'espace de spineurs symétriques $\mathcal{E}^{(2j_1, 2j_2)}$.*

Preuve :
Nous avons

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_*^{(\frac{1}{2},0)}(I_j) &= \frac{1}{2i}\sigma_j, & \mathcal{D}_*^{(\frac{1}{2},0)}(K_j) &= \frac{1}{2}\sigma_j, \\ \mathcal{D}_*^{(0,\frac{1}{2})}(I_j) &= -\frac{1}{2i}\bar{\sigma}_j, & \mathcal{D}_*^{(0,\frac{1}{2})}(K_j) &= \frac{1}{2}\bar{\sigma}_j, \end{aligned} \quad (4.99)$$

ce qui implique

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{D}}_*^{(\frac{1}{2},0)}(M_j) &= \frac{1}{2i}\sigma_j, & \tilde{\mathcal{D}}_*^{(\frac{1}{2},0)}(N_j) &= 0, \\ \tilde{\mathcal{D}}_*^{(0,\frac{1}{2})}(M_j) &= 0, & \tilde{\mathcal{D}}_*^{(0,\frac{1}{2})}(N_j) &= -\frac{1}{2i}\bar{\sigma}_j, \\ \text{donc } \tilde{\mathcal{D}}_*^{(\frac{1}{2},0)} &= \mathcal{D}^{\frac{1}{2}} \times \mathcal{D}^0. \end{aligned} \quad (4.100)$$

Comme $-\bar{\sigma}_j = \epsilon\sigma_j\epsilon^{-1}$, on a $\tilde{\mathcal{D}}_*^{(0,\frac{1}{2})} = \mathcal{D}_*^0 \oplus \epsilon\mathcal{D}_*^{\frac{1}{2}}\epsilon^{-1} \cong \mathcal{D}_*^0 \oplus \mathcal{D}_*^{\frac{1}{2}}$, i.e., $\tilde{\mathcal{D}}^{(0,\frac{1}{2})} \cong \mathcal{D}^0 \otimes \mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$.

Il s'ensuit que les représentations $\tilde{\mathcal{D}}^{(j_1,j_2)}$ de $SU(2) \times SU(2)$ sur $\mathcal{E}^{(2j_1,2j_2)}$ sont équivalentes aux $\mathcal{D}^{j_1} \times \mathcal{D}^{j_2}$, puisque les sous-groupes $SU(2) \times \mathbb{I}$ et $\mathbb{I} \times SU(2)$ se transforment avec $\mathcal{D}^{j_1} \times \mathbb{I}$ et $\mathbb{I} \times \mathcal{D}^{j_2}$. ■

Remarque :

L'équivalence de $sl(2, \mathbb{C})$ et $su(2) \times su(2)$ est due au fait qu'il s'agit de deux formes réelles différentes de la même algèbre complexe.

Conséquences :

- i) Les représentations $\{\mathcal{D}^{(j_1,j_2)} \mid j_1, j_2 = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots\}$ forment le système complet de toutes les représentations irréductibles de dimension finie de $SL(2, \mathbb{C})$.
- ii) La série de Clebsch-Gordan pour $SU(2) \times SU(2)$,

$$(\mathcal{D}^{j_1} \times \mathcal{D}^{j_2}) \otimes (\mathcal{D}^{j'_1} \times \mathcal{D}^{j'_2}) = \bigoplus_{k=|j_1-j'_1|}^{|j_1+j'_1|} \bigoplus_{\ell=|j_2-j'_2|}^{|j_2+j'_2|} (\mathcal{D}^k \times \mathcal{D}^\ell), \quad (4.101)$$

implique

$$\mathcal{D}^{(j_1,j_2)} \otimes \mathcal{D}^{(j'_1,j'_2)} = \bigoplus_{k=|j_1-j'_1|}^{|j_1+j'_1|} \bigoplus_{\ell=|j_2-j'_2|}^{|j_2+j'_2|} \mathcal{D}^{(k,\ell)}. \quad (4.102)$$

- iii) Comme ceci est le cas pour les représentations de $SU(2) \times SU(2)$, toute représentation de $SL(2, \mathbb{C})$ de dimension finie est complètement réductible. (Mais ceci n'est pas vrai pour les représentations de dimension infinie de $SL(2, \mathbb{C})$!)

Nous notons encore que

$$\mathcal{D}^{(j_1,j_2)}(-\mathbb{I}) = (-1)^{2(j_1+j_2)} \mathbb{I}, \quad (4.103)$$

ce qui implique que, pour tout $A \in SL(2, \mathbb{C})$, on a

$$\mathcal{D}^{(j_1,j_2)}(-A) = (-1)^{2(j_1+j_2)} \mathcal{D}^{(j_1,j_2)}(A). \quad (4.104)$$

Comme l'homomorphisme $\Pi : SL(2, \mathbb{C}) \rightarrow \mathcal{L}_+^\uparrow$ applique A et $-A$ au même élément de \mathcal{L}_+^\uparrow , $\Pi(A) = \Pi(-A)$, $\mathcal{D}^{(j_1, j_2)}$ est une représentation de \mathcal{L}_+^\uparrow si j_1 et j_2 sont les deux entiers ou les deux demi-entiers.

Pour toute matrice $A \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$, nous définissons

$$\boxed{\hat{A} := \epsilon \bar{A} \epsilon^{-1}} \quad (4.105)$$

L'équation (4.83) implique $\bar{A} = \epsilon^{-1} (A^{-1})^* \epsilon$, et donc

$$\boxed{\hat{A} = (A^{-1})^*} . \quad (4.106)$$

- * Les composantes spinorielles contravariantes $v^{\dot{\beta}}$ se transforment avec \hat{A} , ce qui est équivalent à $\mathcal{D}^{(0, \frac{1}{2})}(A)$.
- * Si $A \in SU(2)$, i.e., $A^* = A^{-1}$, nous avons $\hat{A} = A$. Un indice contravariant avec point se transforme sous $SU(2)$ comme un indice covariant sans point ($v^{\dot{\alpha}} \sim u_\alpha$). De même, un indice covariant avec point se transforme comme un indice contravariant sans point ($v_{\dot{\alpha}} \sim u^\alpha$).
- * Si $A \in SL(2, \mathbb{C})$ et $A^* = A$, nous avons $\hat{A} = A^{-1}$.

Connexion entre spineurs et quadri-vecteurs

Nous voulons maintenant établir de manière explicite la connexion entre les spineurs et les quadri-vecteurs (ou tenseurs) usuels. Ce faisant, nous verrons que les quadri-vecteurs peuvent être vus comme de spineurs à deux indices mixtes, le premier sans point, et le deuxième avec point. Donc l'algèbre des tenseurs est immergée dans l'algèbre des spineurs.

Pour trouver le caractère spinoriel des quadri-vecteurs, nous rappelons la forme de l'homomorphisme entre $SL(2, \mathbb{C})$ et \mathcal{L}_+^\uparrow ,

$$\begin{aligned} \sim : \mathbb{R}^4 &\rightarrow \mathbb{C}^{2 \times 2} \\ x &\mapsto \tilde{x} = x^\mu \sigma_\mu = \begin{pmatrix} x^0 + x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & x^0 - x^3 \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (4.107)$$

Sous une transformation de Lorentz donnée par $A \in SL(2, \mathbb{C})$, \tilde{x} se transforme comme

$$\left(\widetilde{\Lambda(A)x} \right)_{\alpha\dot{\beta}} = (A\tilde{x}A^*)_{\alpha\dot{\beta}} = A_\alpha^\sigma \tilde{x}_{\sigma\dot{\gamma}} A^{*\dot{\gamma}}_{\dot{\beta}} = A_\alpha^\sigma \tilde{x}_{\sigma\dot{\gamma}} \bar{A}_{\dot{\beta}}^{\dot{\gamma}} . \quad (4.108)$$

Nous avons donc bien fait de choisir un indice sans point et un indice avec point pour \tilde{x} , car ce spineur se transforme avec $\mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})}$, comme nous l'avons anticipé.

L'homomorphisme $(x^\mu) \mapsto (\tilde{x}_{\alpha\dot{\beta}})$ associe les composantes du quadri-vecteur $x = (x^\mu) \in \mathbb{R}^4$ à celles d'un tenseur mixte de rang 2, noté $\tilde{x} = (\tilde{x}_{\alpha\dot{\beta}})$, i.e.,

$$\boxed{\tilde{x}_{\alpha\dot{\beta}} = x^\mu (\sigma_\mu)_{\alpha\dot{\beta}} = x_\mu (\sigma^\mu)_{\alpha\dot{\beta}}} \quad (4.109)$$

Pour cette correspondance, nous avons utilisé les matrices de Pauli à indices

spinoriels covariants (on a aussi $(\sigma^\mu)_{\alpha\dot{\beta}} = g^{\mu\nu} (\sigma_\nu)_{\alpha\dot{\beta}}$) données par

$$\begin{aligned} \left((\sigma_0)_{\alpha\dot{\beta}} \right) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & \left((\sigma_1)_{\alpha\dot{\beta}} \right) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \left((\sigma_2)_{\alpha\dot{\beta}} \right) &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, & \left((\sigma_3)_{\alpha\dot{\beta}} \right) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.110)$$

Nous définissons des composantes spinorielles contravariantes $(\sigma_\mu)^{\alpha\dot{\beta}}$ par conjugaison des composantes spinorielles covariantes $(\sigma_\mu)_{\rho\dot{\gamma}}$ avec la forme spinorielle ϵ donnée par Eq. (4.76), i.e.,

$$\boxed{(\sigma_\mu)^{\alpha\dot{\beta}} = \epsilon^{\alpha\rho} (\sigma_\mu)_{\rho\dot{\gamma}} \epsilon^{\dot{\beta}\dot{\gamma}} = (\epsilon\sigma_\mu\epsilon^T)^{\alpha\dot{\beta}}} \quad (4.111)$$

Un bref calcul montre que

$$(\sigma_\mu)^{\alpha\dot{\beta}} = (\epsilon\sigma_\mu\epsilon^T)^{\alpha\dot{\beta}} = \begin{cases} +(\sigma_0)_{\alpha\dot{\beta}}, & \mu = 0 \\ -(\sigma_i)_{\alpha\dot{\beta}}, & \mu = i = 1, 3 \\ +(\sigma_i)_{\alpha\dot{\beta}}, & \mu = 2 \end{cases} = ((\sigma^\mu)^T)_{\alpha\dot{\beta}}, \quad (4.112)$$

$$\text{et } (\sigma_\mu)_{\alpha\dot{\beta}} (\sigma^\mu)_{\gamma\dot{\sigma}} = 2 \left(\delta_{\alpha\dot{\beta}} \delta_{\gamma\dot{\sigma}} - \delta_{\alpha\dot{\sigma}} \delta_{\gamma\dot{\beta}} \right) = 2\epsilon_{\alpha\gamma} \epsilon_{\dot{\beta}\dot{\sigma}}. \quad (4.113)$$

La relation (4.113) se vérifie pour chaque composante. Les seules composantes non-nulles sont $\alpha\gamma\dot{\beta}\dot{\sigma} = 12\dot{1}\dot{2}$, $21\dot{2}\dot{1}$, $21\dot{1}\dot{2}$ et $12\dot{2}\dot{1}$. En résumé, les composantes des matrices de Pauli spinorielles sont

$$\begin{aligned} (\sigma_0)_{\alpha\dot{\beta}} &= +(\sigma^0)_{\alpha\dot{\beta}} = +(\sigma_0)^{\alpha\dot{\beta}} = +(\sigma^0)^{\alpha\dot{\beta}}, \\ (\sigma_1)_{\alpha\dot{\beta}} &= -(\sigma^1)_{\alpha\dot{\beta}} = -(\sigma_1)^{\alpha\dot{\beta}} = +(\sigma^1)^{\alpha\dot{\beta}}, \\ (\sigma_2)_{\alpha\dot{\beta}} &= -(\sigma^2)_{\alpha\dot{\beta}} = +(\sigma_2)^{\alpha\dot{\beta}} = -(\sigma^2)^{\alpha\dot{\beta}}, \\ (\sigma_3)_{\alpha\dot{\beta}} &= -(\sigma^3)_{\alpha\dot{\beta}} = -(\sigma_3)^{\alpha\dot{\beta}} = +(\sigma^3)^{\alpha\dot{\beta}}. \end{aligned} \quad (4.114)$$

Avec les expressions (4.114), on peut vérifier directement que les matrices de Pauli satisfont

$$\sigma_i \sigma_j = \mathbb{1} \delta_{ij} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (4.115)$$

Comme pour les matrices $A \in SL(2, \mathbb{C})$, nous posons aussi

$$\boxed{\hat{\sigma}_\mu = \epsilon \bar{\sigma}_\mu \epsilon^T} \quad (4.116)$$

On vérifie facilement les identités suivantes

$$(\hat{\sigma}_\mu)^{\dot{\beta}\alpha} = (\bar{\sigma}_\mu)_{\alpha\dot{\beta}}, \quad \hat{\sigma}_\mu = g^{\mu\nu} \sigma_\nu \equiv \sigma^\mu, \quad (4.117)$$

et les relations

$$(\sigma_\mu)_{\alpha\dot{\beta}} (\sigma_\nu)^{\rho\dot{\beta}} + (\sigma_\nu)_{\alpha\dot{\beta}} (\sigma_\mu)^{\rho\dot{\beta}} = (\sigma_\mu \hat{\sigma}_\nu + \sigma_\nu \hat{\sigma}_\mu)_{\alpha}{}^{\rho} = 2g_{\mu\nu} \delta_{\alpha}{}^{\rho}, \quad (4.118)$$

$$(\sigma_\mu)_{\alpha\dot{\beta}} (\sigma_\nu)^{\alpha\dot{\gamma}} + (\sigma_\nu)_{\alpha\dot{\beta}} (\sigma_\mu)^{\alpha\dot{\gamma}} = (\hat{\sigma}_\mu \sigma_\nu + \hat{\sigma}_\nu \sigma_\mu)_{\dot{\beta}}{}^{\dot{\gamma}} = 2g_{\mu\nu} \delta_{\dot{\beta}}{}^{\dot{\gamma}}. \quad (4.119)$$

Ces relations mènent à plusieurs identités utiles, par exemple

$$\begin{aligned}\tilde{x}_{\alpha\dot{\beta}}\tilde{y}^{\alpha\dot{\beta}} &= \left[x^\mu(\sigma_\mu)_{\alpha\dot{\beta}} \right] \left[y^\nu(\sigma_\nu)^{\alpha\dot{\beta}} \right] \\ &= \frac{1}{2}x^\mu y^\nu \left[(\sigma_\mu)_{\alpha\dot{\beta}}(\sigma_\nu)^{\alpha\dot{\beta}} + (\sigma_\nu)_{\alpha\dot{\beta}}(\sigma_\mu)^{\alpha\dot{\beta}} \right] \\ &= \frac{1}{2}x^\mu y^\nu [4g_{\mu\nu}] = 2x^\mu y_\mu .\end{aligned}\quad (4.120)$$

Pour μ fixé, en choisissant

$$y^\nu = \begin{cases} 1 & \text{si } \nu = \mu , \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

l'équation (4.120) nous permet de retrouver les composantes x^μ à partir des matrices $\tilde{x}_{\alpha\dot{\beta}}$. En effet, on trouve les relations

$$\boxed{x_\mu = \frac{1}{2}\tilde{x}_{\alpha\dot{\beta}}(\sigma_\mu)^{\alpha\dot{\beta}} \quad \text{et} \quad x^\mu = \frac{1}{2}\tilde{x}_{\alpha\dot{\beta}}(\sigma^\mu)^{\alpha\dot{\beta}}}\quad (4.121)$$

Ces relations exhibent l'immersion de l'algèbre des tenseurs dans l'algèbre des spineurs. Les indices des quadri-vecteurs sont associés à *une paire* d'indices spinoriels, l'un sans point et l'autre avec point ; les composantes des quadri-vecteurs sont donc bilinéaires dans les composantes des spineurs (u_α) et ($v_{\dot{\beta}}$).

De même, un quadri-tenseur de rang r correspond à un spineur de rang $2r$ qui a r indices sans point et r indices avec point. De $T^{\mu_1 \dots \mu_r}$ on trouve le spineur par

$$\begin{aligned}\tilde{T}_{\alpha_1 \dots \alpha_r \dot{\beta}_1 \dots \dot{\beta}_r} &= T^{\mu_1 \dots \mu_r} (\sigma_{\mu_1})_{\alpha_1 \dot{\beta}_1} \dots (\sigma_{\mu_r})_{\alpha_r \dot{\beta}_r} \quad \text{et} \\ T^{\mu_1 \dots \mu_r} &= \left(\frac{1}{2}\right)^r \tilde{T}_{\alpha_1 \dots \alpha_r \dot{\beta}_1 \dots \dot{\beta}_r} (\sigma^{\mu_1})^{\alpha_1 \dot{\beta}_1} \dots (\sigma^{\mu_r})^{\alpha_r \dot{\beta}_r} .\end{aligned}\quad (4.122)$$

4.3.2 Représentations de \mathcal{L}^\dagger

Opérateur parité

Soit $(\sigma_\mu) := (\sigma_0, \boldsymbol{\sigma}) = (\mathbb{I}, \boldsymbol{\sigma})$. Nous avons (cf. 4.116)

$$(\hat{\sigma}_\mu) = (\epsilon \bar{\sigma}_\mu \epsilon^{-1}) = (\sigma^\mu) = (g^{\mu\nu} \sigma_\nu) = (\mathbb{I}, -\boldsymbol{\sigma}) .\quad (4.123)$$

Si on considère l'opérateur parité, $\mathcal{P} : (x^0, \mathbf{x}) \mapsto (x^0, -\mathbf{x})$, nous avons

$$\hat{x} = \widetilde{\mathcal{P}x} .\quad (4.124)$$

Ceci implique alors

$$\widetilde{\mathcal{P}\Lambda(A)x} = \widetilde{\Lambda(A)x} = \widetilde{A\tilde{x}A^*} = \hat{A}\hat{x}\hat{A}^* = \Lambda(\hat{A})\hat{x} = \widetilde{\Lambda(\hat{A})\mathcal{P}x} ,\quad (4.125)$$

ce qui revient à dire que

$$\mathcal{P}\Lambda(A)x = \Lambda(\hat{A})\mathcal{P}x .\quad (4.126)$$

Les rotations ($A \in SU(2)$, $\hat{A} = A$) commutent avec l'opérateur parité, comme il faut.

Représentations de la parité

La parité est également une opération de symétrie pour les interactions électromagnétiques et fortes. Nous avons donc besoin des représentations projectives de $\mathcal{L}^\dagger = \mathcal{L}_+^\dagger \cup \mathcal{P}\mathcal{L}_+^\dagger \equiv \mathcal{L}_+^\dagger \times (\mathbb{I}, \mathcal{P})$. En particulier, nous avons

$$\mathcal{L}_{mq}^\dagger = SL(2, \mathbb{C}) \times (\mathbb{I}, \mathcal{P}) . \quad (4.127)$$

Ce produit est semi-direct ². L'opérateur \mathcal{P} agit sur $SL(2, \mathbb{C})$ par $\mathcal{P}A = \hat{A}$, i.e., Eq. (4.126) implique

$$(A, \mathcal{P}) \circ (B, \mathbb{I}) = (A\mathcal{P}B, \mathcal{P}\mathbb{I}) = (A\hat{B}, \mathcal{P}) = (A, \mathbb{I}) \circ (\hat{B}, \mathcal{P}) . \quad (4.128)$$

Nous avons donc $(\mathbb{I}, \mathcal{P}) \circ (A, \mathbb{I}) = (\hat{A}, \mathcal{P})$ et $(\mathbb{I}, \mathcal{P}) \circ (A, \mathbb{I}) \circ (\mathbb{I}, \mathcal{P}) = (\hat{A}, \mathbb{I})$.

Le recouvrement est défini par

$$\begin{aligned} \Pi : \mathcal{L}_{mq}^\dagger &\rightarrow \mathcal{L}^\dagger \\ (A, \mathcal{P}) &\mapsto \Lambda(A)\mathcal{P} \\ (A, \mathbb{I}) &\mapsto \Lambda(A) . \end{aligned} \quad (4.129)$$

D'après Eq. (4.126), nous avons

$$\Pi(\mathbb{I}, \mathcal{P}) \circ \Pi(A, \mathbb{I}) = \Pi(\hat{A}, \mathcal{P}) = \Pi((\mathbb{I}, \mathcal{P}) \circ (A, \mathbb{I})) . \quad (4.130)$$

Le produit semi-direct défini par Eq. (4.128) implique alors que Π est bien un homomorphisme de groupe.

Nous considérons une représentation irréductible T de \mathcal{L}_{mq}^\dagger sur un espace vectoriel complexe de dimension finie, \mathcal{E} :

$$\begin{aligned} T : \mathcal{L}_{mq}^\dagger &\rightarrow \text{iso}(\mathcal{E}) \\ (A, \mathbb{I}) &\mapsto T(A) , \\ (\mathbb{I}, \mathcal{P}) &\mapsto T_s . \end{aligned} \quad (4.131)$$

Comme nous devons avoir $T_s^2 = \mathbb{I}$ et $T_s T(A) T_s^{-1} = T(\hat{A})$, c'est-à-dire $A \mapsto T(A)$ et $A \mapsto T(\hat{A})$ sont des représentations équivalentes de $SL(2, \mathbb{C})$.

Nous décomposons \mathcal{E} en sous-espaces qui se transforment irréductiblement sous $SL(2, \mathbb{C})$. Soit $\mathcal{E}^{(p,q)} \subset \mathcal{E}$, un sous-espace qui se transforme avec $\mathcal{D}^{(p,q)}$ sous $SL(2, \mathbb{C})$. Soit encore $\mathcal{F}^{(p,q)} := T_s \mathcal{E}^{(p,q)}$. Pour $u \in \mathcal{E}^{(p,q)}$, nous avons

$$T(A)T_s u = T_s \underbrace{T(\hat{A})u}_{\in \mathcal{E}^{(p,q)}} \in \mathcal{F}^{(p,q)} . \quad (4.132)$$

Il suit alors que $\mathcal{F}^{(p,q)}$ est aussi invariant sous $SL(2, \mathbb{C})$. Avec $\mathcal{E}^{(p,q)}$, cet espace est aussi irréductible. $\mathcal{F}^{(p,q)}$ porte la représentation $T_s T(A) T_s^{-1} = T(\hat{A})$ de $SL(2, \mathbb{C})$, qui est équivalente à $\mathcal{D}^{(q,p)}$. Il y a alors deux possibilités :

²Soient H et K deux groupes et soit τ un homomorphisme $\tau : K \rightarrow \text{hom}(H) : k \mapsto \tau(k)$ (i.e., pour un k fixé, $\tau(k)$ envoie tout $h \in H$ vers $\tau(k)h \in H$). Alors, l'ensemble de toutes les paires (h, k) avec $h \in H$ et $k \in K$, avec la loi de composition

$$(h_1, k_1) \circ (h_2, k_2) = (h_1 \tau(k_1) h_2, k_1 k_2)$$

forme un groupe, appelé un *produit semi-direct* de H et K et noté $H \times K$, comme le produit direct. Si $\tau(k) \equiv id$ on retrouve le produit direct.

i) $\mathcal{E}^{(p,q)} = \mathcal{F}^{(p,q)} = \mathcal{E}$.

La restriction de T sur $SL(2, \mathbb{C})$ est alors irréductible. De plus, Eq. (4.132) montre alors que A et \hat{A} opèrent de façon équivalente sur \mathcal{E} . Ceci n'est possible que si $p = q$ (représentation auto-conjuguée). Nous avons alors $T|_{SL(2, \mathbb{C})} = \mathcal{D}^{(p,p)}$. La parité n'augmente pas la dimension de la représentation,

$$T_s \mathcal{D}^{(p,p)}(A) T_s^{-1} = \mathcal{D}^{(p,p)}(\hat{A}) . \quad (4.133)$$

ii) $\mathcal{E}^{(p,q)} \cap \mathcal{F}^{(p,q)} = \{0\}$.

Dans ce cas, nous posons

$$T(A)|_{\mathcal{F}^{(p,q)}} =: \dot{\mathcal{D}}^{(p,q)}(A) . \quad (4.134)$$

Ici, Eq. (4.132) implique que $A \mapsto \dot{\mathcal{D}}^{(p,q)}(A)$ est équivalente à $A \mapsto \mathcal{D}^{(p,q)}(\hat{A})$. Mais $\mathcal{D}^{(p,q)}(\hat{A})$ est équivalent à $\mathcal{D}^{(q,p)}(A)$. Donc

$$T|_{SL(2, \mathbb{C})} \cong \begin{pmatrix} \mathcal{D}^{(p,q)} & 0 \\ 0 & \mathcal{D}^{(q,p)} \end{pmatrix} = \mathcal{D}^{(p,q)} \oplus \mathcal{D}^{(q,p)} . \quad (4.135)$$

Dans ce cas, la parité double la dimension de $\mathcal{E} = \mathcal{E}^{(p,q)} \oplus \mathcal{E}^{(q,p)}$ et la parité applique le premier sous-espace sur le deuxième, et vice versa.

Nous montrons encore que, dans ce deuxième cas, T est irréductible si et seulement si $p \neq q$. Pour ceci, nous supposons $p = q$ et nous choisissons une base telle que

$$T|_{SL(2, \mathbb{C})} = \begin{pmatrix} \mathcal{D}^{(p,p)} & 0 \\ 0 & \mathcal{D}^{(p,p)} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad T_s = \begin{pmatrix} 0 & \Sigma \\ \tilde{\Sigma} & 0 \end{pmatrix} . \quad (4.136)$$

Alors, $T_s^2 = \mathbb{1}$ implique que $\tilde{\Sigma} = \Sigma^{-1}$. De plus, Eq. (4.132) implique que

$$\Sigma \mathcal{D}^{(p,p)}(A) \Sigma^{-1} = \mathcal{D}^{(p,p)}(\hat{A}) . \quad (4.137)$$

Si nous posons $S = \begin{pmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & \tilde{\Sigma} \end{pmatrix}$, il s'ensuit alors que

$$ST(A)S^{-1} = T(\hat{A}) = T_s T(A) T_s . \quad (4.138)$$

Donc $L = ST_s = \begin{pmatrix} 0 & \Sigma^2 \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix}$ commute avec $T(A)$ et avec T_s . D'après le Lemme de Schur, T n'est donc pas irréductible (car tous les $T(A)$, $A \in \mathcal{L}_{mq}^1$ commutent avec $L \neq \lambda \mathbb{1}$!).

Dans le cas $p \neq q$, $T|_{SL(2, \mathbb{C})}$ est la somme directe $\mathcal{D}^{(p,q)} \oplus \mathcal{D}^{(q,p)}$ et

$$T_s = \begin{pmatrix} 0 & \Sigma \\ \Sigma^{-1} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.139)$$

échange les deux termes, i.e.,

$$\Sigma^{-1} \mathcal{D}^{(p,q)}(A) \Sigma = \mathcal{D}^{(q,p)}(\hat{A}) , \quad (4.140)$$

$$\Sigma \mathcal{D}^{(q,p)}(A) \Sigma^{-1} = \mathcal{D}^{(p,q)}(\hat{A}) . \quad (4.141)$$

4.4 Champs de spineurs et équations de champs covariantes

En prélude à la discussion des champs de spineurs et de leurs équations covariantes, nous définissons des opérateurs de différentiation.

4.4.1 Opérateurs de différentiation

Par analogie avec le gradient covariant $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ où $x = (x^\mu) = (x^0, \mathbf{x})$, nous définissons un gradient à indice spinoriel $\tilde{\partial} = \partial_{\tilde{x}} = (\partial_{\alpha\dot{\beta}})$ d'après la formule de connexion (4.109)

$$\tilde{\partial} := \sigma_\mu \partial^\mu = g^{\mu\nu} \sigma_\mu \partial_\nu = \sigma_0 \partial_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} = \mathbb{I}_2 \partial_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} . \quad (4.142)$$

Le comportement de $(\partial_{\alpha\dot{\beta}})$ sous des transformations $A \in SL(2, \mathbb{C})$ est indiqué par la position des indices. D'autre part, la forme spinorielle définie par Eq. (4.76) permet d'obtenir directement l'opérateur de différentiation contravariant³,

$$(\partial^{\alpha\dot{\beta}}) = \epsilon \tilde{\partial} \epsilon^T = (\epsilon \tilde{\partial}^T \epsilon^T)^T = (\epsilon \tilde{\partial}^T \epsilon^{-1})^T = (\epsilon \bar{\tilde{\partial}} \epsilon^{-1})^T = (\hat{\tilde{\partial}})^T . \quad (4.143)$$

En composantes, nous avons donc (rappeller que $\epsilon \sigma_i \epsilon = -\sigma_i^T$)

$$\partial_{\alpha\dot{\beta}} = \partial^\mu (\sigma_\mu)_{\alpha\dot{\beta}} = (\mathbb{I}_2 \partial_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla})_{\alpha\dot{\beta}} , \quad (4.144)$$

$$\partial^{\alpha\dot{\beta}} = \epsilon^{\alpha\gamma} \partial_{\gamma\dot{\sigma}} \epsilon^{\dot{\beta}\dot{\sigma}} = (\mathbb{I}_2 \partial_0 + \boldsymbol{\sigma}^T \cdot \boldsymbol{\nabla})^{\alpha\dot{\beta}} . \quad (4.145)$$

Ces expressions nous permettent de construire des opérateurs différentiels du deuxième ordre, tels que $\Delta = \boldsymbol{\nabla}^2$ et \square . Si nous faisons le calcul en composantes, nous obtenons avec (4.111)

$$\begin{aligned} \partial_{\alpha\dot{\beta}} \partial^{\alpha\dot{\gamma}} &= (\mathbb{I}_2 \partial_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla})_{\alpha\dot{\beta}} (\mathbb{I}_2 \partial_0 + \boldsymbol{\sigma}^T \cdot \boldsymbol{\nabla})^{\alpha\dot{\gamma}} \\ &= (\mathbb{I}_2 \partial_0 - \boldsymbol{\sigma}^T \cdot \boldsymbol{\nabla})_{\dot{\beta}\alpha} (\mathbb{I}_2 \partial_0 + \boldsymbol{\sigma}^T \cdot \boldsymbol{\nabla})^{\alpha\dot{\gamma}} \\ &= [(\mathbb{I}_2 \partial_0 - \boldsymbol{\sigma}^T \cdot \boldsymbol{\nabla}) (\mathbb{I}_2 \partial_0 + \boldsymbol{\sigma}^T \cdot \boldsymbol{\nabla})]_{\dot{\beta}}^{\dot{\gamma}} \\ &= (\partial_0^2 - \boldsymbol{\nabla}^2) \delta_{\dot{\beta}}^{\dot{\gamma}} \\ &= \square \delta_{\dot{\beta}}^{\dot{\gamma}} . \end{aligned} \quad (4.146)$$

Ici nous avons employé l'identité (4.115). Le même résultat est obtenu sous forme matricielle à l'aide de (4.116),

$$\begin{aligned} \partial_{\alpha\dot{\beta}} \partial^{\alpha\dot{\gamma}} &= (\tilde{\partial}^T (\hat{\tilde{\partial}})^T)_{\dot{\beta}}^{\dot{\gamma}} = [(\hat{\tilde{\partial}} \tilde{\partial})^T]_{\dot{\beta}}^{\dot{\gamma}} = [(\hat{\sigma}^\mu \sigma^\nu)^T \partial_\mu \partial_\nu]_{\dot{\beta}}^{\dot{\gamma}} \\ &= \frac{1}{2} [(\hat{\sigma}^\mu \sigma^\nu + \sigma^\mu \hat{\sigma}^\nu)^T \partial_\mu \partial_\nu]_{\dot{\beta}}^{\dot{\gamma}} = [\mathbb{I}_2 g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu]_{\dot{\beta}}^{\dot{\gamma}} = \square \delta_{\dot{\beta}}^{\dot{\gamma}} . \end{aligned} \quad (4.147)$$

Pour l'opérateur d'onde (invariant relativiste), on obtient donc⁴

$$\boxed{\partial_{\alpha\dot{\beta}} \partial^{\alpha\dot{\gamma}} = \square \delta_{\dot{\beta}}^{\dot{\gamma}} \quad \partial_{\alpha\dot{\beta}} \partial^{\gamma\dot{\beta}} = \square \delta_\alpha^\gamma \quad \frac{1}{2} \partial_{\alpha\dot{\beta}} \partial^{\alpha\dot{\beta}} = \square} \quad (4.148)$$

³Pour tout quadri-vecteur x^μ réel, nous avons $\tilde{x}^T = (x^\mu \sigma_\mu)^T = x^\mu \bar{\sigma}_\mu = \bar{\tilde{x}}$, et donc $\tilde{\partial}^T = \bar{\tilde{\partial}}$. De plus, on a $\hat{\tilde{\partial}} = \epsilon \bar{\tilde{\partial}} \epsilon^{-1}$ puisque l'on a $\hat{A} = \epsilon \bar{A} \epsilon^{-1}$ pour toute $A \in SL(2, \mathbb{C})$, et $\epsilon^{-1} = \epsilon^T = -\epsilon$.

⁴On peut également procéder par directe analogie avec Eq. (4.120).

4.4.2 Equations de champs covariantes

Ayant construit des opérateurs de différentiation, nous considérons maintenant les champs de spineurs qui dépendent de $x = (x^0, \mathbf{x})$ et qui, sous une transformation de Lorentz $x \mapsto x' = \Lambda x$, se transforment d'après la représentation $\mathcal{D}^{(\frac{n}{2}, \frac{m}{2})}$. Un champ spinoriel de rang (n, m) est alors un champ Ψ qui se transforme, sous une transformation de Lorentz $A \in SL(2, \mathbb{C})$, comme

$$\Psi_{\alpha_1 \dots \alpha_n, \dot{\beta}_1 \dots \dot{\beta}_m}(x) = A_{\alpha_1}{}^{\delta_1} \dots A_{\alpha_n}{}^{\delta_n} \bar{A}_{\dot{\beta}_1}{}^{\dot{\gamma}_1} \dots \bar{A}_{\dot{\beta}_m}{}^{\dot{\gamma}_m} \Psi_{\delta_1 \dots \delta_n, \dot{\gamma}_1 \dots \dot{\gamma}_m}(\Lambda(A)^{-1}x). \quad (4.149)$$

Nous allons étudier quelques représentations, principalement celles avec de petits m et n .

Champ vectoriel

Pour un champ vectoriel V_μ , nous définissons le spineur correspondant par

$$(V_{\alpha\dot{\beta}}) = \tilde{V} = V^\mu \sigma_\mu. \quad (4.150)$$

Si on applique l'opérateur de différentiation du premier ordre à cette définition, nous obtenons (cf. § A.2)

$$\partial_{\alpha\dot{\beta}} V^{\alpha\dot{\beta}} = \text{tr}(\tilde{\partial}\tilde{V}) = \text{tr}(\sigma_\mu \hat{\sigma}_\nu) \partial^\mu V^\nu = \text{tr}(\mathbb{I}_2) g_{\mu\nu} \partial^\mu V^\nu = 2\partial_\mu V^\mu, \quad (4.151)$$

ce qui implique

$$\boxed{\frac{1}{2} \partial_{\alpha\dot{\beta}} V^{\alpha\dot{\beta}} = \partial_\mu V^\mu} \quad (4.152)$$

Champ scalaire : cas $n = 0$, $m = 0$

Nous considérons un champ scalaire $\varphi(x)$, réel ou complexe. Ce champ se transforme trivialement sous des transformations de Lorentz,

$$\varphi'(x') = \varphi(x), \quad x' = \Lambda x. \quad (4.153)$$

En absence d'interaction, l'équation d'onde pour ce champ se donne par pure correspondance. Pour cela, on utilise les *relations de de Broglie*,

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad p = (p^\mu) = (E/c, \mathbf{p}), \quad k = (k^\mu) = (\omega/c, \mathbf{k}). \quad (4.154)$$

Si m dénote la masse au repos, la relation d'Einstein $E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$ implique

$$m^2 c^2 = (E/c)^2 - \mathbf{p}^2 = p^2 = \hbar^2 k^2 = \hbar^2 [(\omega/c)^2 - \mathbf{k}^2]. \quad (4.155)$$

Une superposition d'ondes planes définies par

$$\varphi(x) = \int d^3k \phi(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega t)} \quad \text{avec} \quad \frac{\omega^2}{c^2} = \mathbf{k}^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}, \quad (4.156)$$

satisfait alors à l'équation de Klein-Gordon :

$$\boxed{\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \varphi(x) = 0} \quad (4.157)$$

La quantité $\lambda = \hbar/(mc)$ correspond à la longueur d'onde de Compton de la particule. Pour $m = 0$, on obtient une équation d'onde, ce qui est en accord avec le fait que des particules de masse nulle se déplacent à la vitesse de la lumière. A noter que dans ce cas, la constante de Planck \hbar disparaît; il n'y a pas de mécanique quantique non-relativiste pour un champ de masse nulle, et donc, il n'existe pas de "first quantized mass zero theory".

Spineur de Weyl : cas $n = \frac{1}{2}$, $m = 0$

Nous considérons maintenant un champ spinoriel du type $\mathcal{D}^{(\frac{1}{2},0)}$, i.e., un champ spinoriel $\varphi(x) = (\varphi_\alpha) = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$ qui se transforme, sous une transformation de Lorentz, comme

$$\varphi'(x') = A\varphi(x) \quad \text{où } A \in SL(2, \mathbb{C}) \quad \text{et } x' = \Lambda(A)x. \quad (4.158)$$

En composantes, ceci n'est rien d'autre que

$$\varphi'_\alpha(x') = A_\alpha^\beta \varphi_\beta(x) = A_\alpha^\beta \varphi_\beta(\Lambda(A)^{-1}x'). \quad (4.159)$$

L'équation la plus simple pour ce champ est l'équation de Weyl :

$$\partial^{\alpha\dot{\beta}} \varphi_\alpha = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \hat{\partial} \varphi = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad (\mathbb{I}_2 \partial_0 + \boldsymbol{\sigma}^T \cdot \boldsymbol{\nabla})^T \varphi = 0 \quad (4.160)$$

La double transposition de matrice peut être omise dans Eq. (4.160). Cette équation a deux propriétés intéressantes :

- Comme on a $\partial_{\gamma\dot{\beta}} \partial^{\alpha\dot{\beta}} = \square \delta_\gamma^\alpha$, chaque composante φ_α satisfait également l'équation de Klein-Gordon avec masse $m = 0$. Ce champ se propage donc à la vitesse de la lumière.
- L'équation (4.160) n'est pas invariante sous réflexion de l'espace (parité). Comme nous l'avons vu dans Eq. (4.133), la réflexion de l'espace transforme un champ qui porte la représentation $\mathcal{D}^{(p,q)}$ dans un champ portant la représentation $\mathcal{D}^{(q,p)}$. Pour le spineur de Weyl, nous avons $\mathcal{P} : \varphi(x^0, \mathbf{x}) \mapsto \varphi(x^0, -\mathbf{x}) \equiv \tilde{\varphi}(x)$. Comme φ porte la représentation $\mathcal{D}^{(\frac{1}{2},0)}$, $\tilde{\varphi}$ porte la représentation $\mathcal{D}^{(0,\frac{1}{2})}$ de $SL(2, \mathbb{C})$ et n'est donc pas égal à φ .

Spineur de Weyl : cas $n = 0$, $m = \frac{1}{2}$

Nous considérons maintenant un champ de spineur du type $\mathcal{D}^{(0,\frac{1}{2})}$, i.e., un champ $\chi(x) = (\chi^{\dot{\beta}}) = \begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$ qui se transforme sous une transformation de Lorentz comme

$$\chi'(x') = \bar{A}\chi(x) \quad \text{où } \bar{A} \in SL(2, \mathbb{C}) \quad \text{et } x' = \Lambda(A)x. \quad (4.161)$$

L'équation de Weyl pour ce champ est :

$$\partial_{\alpha\dot{\beta}} \chi^{\dot{\beta}} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \tilde{\partial} \chi = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad (\mathbb{I}_2 \partial_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla}) \chi = 0 \quad (4.162)$$

Or, nous savons que $\hat{\partial} \tilde{\partial} = \square \mathbb{I}_2$. Ainsi, les composantes du champ $\chi(x)$ satisfont à l'équation de d'Alembert (c'est-à-dire l'équation de Klein-Gordon sans masse),

$$\square \chi = (\partial_0^2 - \Delta) \chi = 0. \quad (4.163)$$

Finalement, comme $\varphi = (\varphi_\alpha)$, le champ $\chi = (\chi^{\dot{\beta}})$ n'est pas invariant sous parité.

Ces deux champs sont appelés *spineurs de Weyl*. Ils décrivent des particules de masse nulle et de spin $\frac{1}{2}$ qui ne sont pas invariantes sous l'opération parité : ce sont les neutrinos (φ_α) et les anti-neutrinos ($\chi^{\dot{\beta}}$).

Spineur de Dirac

Nous voulons maintenant d'écrire l'électron, i.e., une particule de spin $\frac{1}{2}$, de masse $m \neq 0$ et qui est invariante sous parité. Pour cela, nous avons besoin de deux champs spinoriels de manière à écrire un système d'équations couplées :

$$\partial^{\alpha\dot{\beta}}\varphi_\alpha = a\chi^{\dot{\beta}}, \quad (\mathbb{I}_2\partial_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla})\varphi = a\chi, \quad (4.164)$$

$$\partial_{\alpha\dot{\beta}}\chi^{\dot{\beta}} = b\varphi_\alpha, \quad (\mathbb{I}_2\partial_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla})\chi = b\varphi, \quad (4.165)$$

où a et b sont des constantes supposées non nulles. Si on dénote les spineurs "réfléchis" par

$$\tilde{\varphi}(x) = \varphi(\mathcal{P}x) \quad \text{et} \quad \tilde{\chi}(x) = \chi(\mathcal{P}x), \quad (4.166)$$

les équations transformées sont alors

$$(\mathbb{I}_2\partial_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla})\tilde{\varphi} = a\tilde{\chi}, \quad (4.167)$$

$$(\mathbb{I}_2\partial_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla})\tilde{\chi} = b\tilde{\varphi}. \quad (4.168)$$

Ces dernières équations sont identiques à Eqs. (4.164)–(4.165), pour autant que l'on pose

$$\tilde{\chi} = \xi\varphi, \quad \tilde{\varphi} = \xi\frac{a}{b}\chi, \quad \xi = \text{cst} \neq 0. \quad (4.169)$$

Nous voulons décrire une particule qui est invariante sous parité, ce qui requiert $(\varphi, \chi) \xrightarrow{\mathcal{P}} (\chi, \varphi)$. Il faut donc choisir $\xi = 1$ et $a = b$. Avec ceci, on obtient les équations couplées

$$i\hbar\hat{\partial}\varphi = i\hbar(\mathbb{I}_2\partial_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla})\varphi = i\hbar a\chi, \quad (4.170)$$

$$i\hbar\tilde{\partial}\chi = i\hbar(\mathbb{I}_2\partial_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla})\chi = i\hbar a\varphi. \quad (4.171)$$

Ces deux équations couplées peuvent être représentées par une unique équation si l'on introduit un spineur à quatre composantes,

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \varphi_\alpha \\ \chi^{\dot{\beta}} \end{pmatrix}. \quad (4.172)$$

D'après ce que nous avons appris dans la section précédente, un tel champ porte la représentation $\mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 0)} \oplus \mathcal{D}^{(0, \frac{1}{2})}$. La parité échange les deux termes. Ce quadrispineur se transforme d'après $(x \mapsto x' = \Lambda(A)x)$

$$\Psi'(x') = S(A)\Psi(x), \quad S(A) = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & \hat{A} \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = \epsilon\bar{A}\epsilon^{-1}. \quad (4.173)$$

La présence de la transformation \hat{A} dans $S(A)$ est due à la contravariance de l'indice $\dot{\beta}$ dans Eq. (4.172). Pour les composantes de $\Psi(x)$, l'équation de Klein-Gordon doit être vérifiée, car elle est une simple conséquence des relations de de

Broglie et du principe de superposition (linéarité de l'équation). De Eqs. (4.170)–(4.171), il suit

$$(i\hbar a)^2 \chi = i\hbar a \left(i\hbar \hat{\partial} \varphi \right) = i\hbar \hat{\partial} \left(i\hbar \tilde{\partial} \chi \right) = -\hbar^2 \hat{\partial} \tilde{\partial} \chi = -\hbar^2 \square \chi . \quad (4.174)$$

Ceci reproduit l'équation de Klein-Gordon si, et seulement si, $(i\hbar a)^2 = (mc)^2$. Ayant déterminé cette dernière constante, nous obtenons les équations de Dirac pour une particule de masse m . En procédant de même pour φ , nous pouvons écrire

$$i\hbar (\mathbb{I}_2 \partial_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla}) \varphi = mc \chi , \quad (4.175)$$

$$i\hbar (\mathbb{I}_2 \partial_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla}) \chi = mc \varphi . \quad (4.176)$$

En plus, l'équation de Klein-Gordon est satisfaite pour chacune des composantes,

$$\left. \begin{array}{l} \left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \varphi = 0 \\ \left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \chi = 0 \end{array} \right\} \longrightarrow \left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi = 0 . \quad (4.177)$$

Nous écrivons encore les équations (4.175) et (4.176) sous forme quadridimensionnelle. Pour ceci, nous introduisons les matrices de Dirac (dans la représentation de Weyl, appelée aussi représentation chirale)

$$(\gamma^\mu)_w = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\mu \\ \hat{\sigma}^\mu & 0 \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \hat{\sigma}^\mu = \epsilon \bar{\sigma}^\mu \epsilon^{-1} = \sigma_\mu . \quad (4.178)$$

Explicitement, nous avons

$$(\gamma^0)_w = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_2 \\ \mathbb{I}_2 & 0 \end{pmatrix} , \quad (\gamma^k)_w = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} . \quad (4.179)$$

On vérifie facilement que ces matrices de Dirac satisfont aux règles d'anticommutation

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \equiv \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \mathbb{I}_4 . \quad (4.180)$$

Les équations (4.175) et (4.176) peuvent alors être condensées sous la forme d'une équation pour le "spineur de Dirac" Ψ à quatre composantes, l'équation de Dirac :

$$\boxed{(-i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu + mc \mathbb{I}_4) \Psi = 0} \quad (4.181)$$

Par construction, cette équation se transforme sous \mathcal{L}_+^\dagger suivant la représentation réductible $\mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 0)} \oplus \mathcal{D}^{(0, \frac{1}{2})}$. Elle est toutefois irréductible par rapport à \mathcal{L}^\dagger , parce que la parité échange les deux composantes.

Dans la Section 4.7, nous allons discuter l'équation de Dirac (4.181) comme généralisation relativiste de l'équation de Schrödinger d'une particule massive de spin 1/2. Mais, comme nous l'avons déjà mentionné, cette interprétation n'est pas tout à fait consistante. Elle contient des problèmes relatifs aux énergies négatives. Ceux-ci ne seront résolus que lors de la quantification du champ de Dirac (cf. [9]).

Avant de considérer les subtilités de l'équation de Dirac, nous voulons encore étudier des équations pour des spins plus élevés. Nous illustrons la méthode générale avec l'exemple du spin $s = \frac{3}{2}$.

Les équations de Pauli-Fierz et Rarita-Schwinger : spin $\frac{3}{2}$

Nous choisissons deux champs spinoriels $\varphi_{\alpha\rho}^{\dot{\sigma}}(x)$ et $\chi_{\rho}^{\dot{\beta}\dot{\sigma}}(x)$ qui se transforment avec $\mathcal{D}^{(1, \frac{1}{2})}$ et $\mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 1)}$, respectivement. Par définition de l'espace des spineurs $\mathcal{E}^{(n, m)}$ (cf. page 108), ces champs sont symétriques dans les indices du même type, $\varphi_{\alpha\rho}^{\dot{\sigma}} = \varphi_{\rho\alpha}^{\dot{\sigma}}$ et $\chi_{\rho}^{\dot{\beta}\dot{\sigma}} = \chi_{\rho}^{\dot{\sigma}\dot{\beta}}$. Le champ de spineurs combiné s'écrit

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \varphi_{\alpha\rho}^{\dot{\sigma}} \\ \chi_{\rho}^{\dot{\beta}\dot{\sigma}} \end{pmatrix}. \quad (4.182)$$

Ce champ porte la représentation $\mathcal{D}^{(1, \frac{1}{2})} \oplus \mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 1)}$; il doit donc être invariant sous parité.

Pour obtenir les équations de champs, nous appliquons les opérateurs de différentiation

$$\partial_{\alpha\dot{\beta}}\chi_{\rho}^{\dot{\beta}\dot{\sigma}} = a\varphi_{\alpha\rho}^{\dot{\sigma}}, \quad (4.183)$$

$$\partial^{\alpha\dot{\beta}}\varphi_{\alpha\rho}^{\dot{\sigma}} = b\chi_{\rho}^{\dot{\beta}\dot{\sigma}}. \quad (4.184)$$

Comme pour le champ de Dirac, l'invariance sous parité de $\Psi(x)$ et les relations de de Broglie dictent $a = b = -imc/\hbar$.

Ceci nous mène aux *équations de Pauli-Fierz* [19, 20] :

$$\boxed{i\hbar\partial_{\alpha\dot{\beta}}\chi_{\rho}^{\dot{\beta}\dot{\sigma}} = mc\varphi_{\alpha\rho}^{\dot{\sigma}} \quad \text{et} \quad i\hbar\partial^{\alpha\dot{\beta}}\varphi_{\alpha\rho}^{\dot{\sigma}} = mc\chi_{\rho}^{\dot{\beta}\dot{\sigma}}} \quad (4.185)$$

Comme $\mathcal{D}^{(1, \frac{1}{2})}|_{SU(2)} = \mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 1)}|_{SU(2)} = \mathcal{D}^{\frac{3}{2}} \oplus \mathcal{D}^{\frac{1}{2}}$, il suit que le champ $\Psi(x)$ décrit un champ de spin $\frac{3}{2}$, mais, en principe, aussi un champ de spin $\frac{1}{2}$. Mais, comme $\varphi_{\alpha\rho}^{\dot{\sigma}}$ est symétrique en α et ρ , il faut aussi demander que $\partial_{\alpha\dot{\beta}}\chi_{\rho}^{\dot{\beta}\dot{\sigma}}$ soit symétrique en α et ρ . De même, la deuxième équation requiert que $\partial^{\alpha\dot{\beta}}\varphi_{\alpha\rho}^{\dot{\sigma}}$ soit symétrique en $\dot{\beta}$ et $\dot{\sigma}$. Or, si on utilise l'anti-symétrie des matrices spinorielles $\epsilon = -\epsilon^T$, ceci est équivalente à

$$\epsilon^{\rho\alpha}\partial_{\alpha\dot{\beta}}\chi_{\rho}^{\dot{\beta}\dot{\sigma}} = 0 \quad \text{et} \quad \epsilon_{\dot{\sigma}\dot{\beta}}\partial^{\alpha\dot{\beta}}\varphi_{\alpha\rho}^{\dot{\sigma}} = 0. \quad (4.186)$$

Aux équations de Pauli-Fierz (4.185), nous devons donc ajouter les contraintes

$$\boxed{\partial_{\alpha\dot{\beta}}\chi^{\alpha\dot{\beta}\dot{\sigma}} = 0 \quad \text{et} \quad \partial^{\alpha\dot{\beta}}\varphi_{\alpha\rho\dot{\beta}} = 0} \quad (4.187)$$

La signification de ces contraintes est plus claire si nous utilisons que

$$i\hbar\partial_{\mu} = i\hbar(\partial_0, \nabla) = (E/c, -\mathbf{p}) = p_{\mu}, \quad (4.188)$$

et nous nous posons dans le système de repos de la particule,

$$i\hbar\partial_{\alpha\dot{\beta}} = p_{\alpha\dot{\beta}} = p_0\delta_{\alpha\dot{\beta}} = mc\delta_{\alpha\dot{\beta}}. \quad (4.189)$$

Les contraintes (4.187) deviennent alors

$$\delta_{\alpha\dot{\beta}}\chi^{\alpha\dot{\beta}\dot{\sigma}} = 0 \quad \text{et} \quad \delta^{\alpha\dot{\beta}}\varphi_{\alpha\rho\dot{\beta}} = 0. \quad (4.190)$$

Or, nous avons vu que, sous des transformations de $SU(2)$, un indice contra-variant avec point se transforme comme un indice covariant sans point (i.e., $u^{\dot{\beta}} \sim u_{\beta}$ sous les transformations $A \in SU(2)$). Il s'ensuit

$$\delta^{\alpha\dot{\beta}} \chi_{\alpha\beta\sigma} = 0 \quad \text{et} \quad \delta^{\alpha\dot{\beta}} \varphi_{\alpha\beta\sigma} = 0, \quad (4.191)$$

ce qui implique que $\chi_{\alpha\beta\sigma}$ et $\varphi_{\alpha\beta\sigma}$ sont des 3-spineurs totalement symétriques à trace nulle. Mais la dimension de 3-spineurs totalement symétriques est $4 = 2 \cdot \frac{3}{2} + 1$, et le nombre magnétique maximal est $\frac{3}{2}$. Donc les équations (4.187) projettent sur la composante de spin $\frac{3}{2}$; le champ $\Psi(x)$ ne contient pas de particule de spin $\frac{1}{2}$.

Les équations pour une particule de spin $\frac{3}{2}$ peuvent encore être exprimées sous une forme différente si l'on utilise les équations qui relient spineurs et quadri-vecteurs, Eq. (4.121). En effet, nous avons vu qu'un indice vectoriel quadri-dimensionnel, μ , peut être assigné à une paire d'indices spinoriels, $\alpha\dot{\beta}$. Ainsi, les composantes $\chi^{\alpha\dot{\beta}\dot{\sigma}}$ d'un spineur de rang 3 doivent pouvoir être mises en correspondance avec les composantes d'une quantité "mixte", $\chi_{\mu}^{\dot{\sigma}}$, qui possède un indice vectoriel et un indice spinoriel. De manière similaire, le spineur $\varphi^{\alpha\rho\dot{\beta}}$ est relié avec φ_{μ}^{α} . Explicitement, nous posons

$$\varphi_{\mu}^{\alpha} := \frac{1}{2} \varphi^{\alpha\rho\dot{\sigma}} (\sigma_{\mu})_{\rho\dot{\sigma}}, \quad \chi_{\mu}^{\dot{\beta}} := \frac{1}{2} \chi^{\rho\dot{\beta}\dot{\sigma}} (\sigma_{\mu})_{\rho\dot{\sigma}}. \quad (4.192)$$

Le champ combiné (4.182) peut donc être mis en correspondance avec un bi-spineur "vectoriel", Ψ_{μ} (où nous omettons les indices spinoriels),

$$\Psi_{\mu}(x) = \begin{pmatrix} \varphi_{\mu} \\ \chi_{\mu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_{\mu}^{\alpha} \\ \chi_{\mu}^{\dot{\beta}} \end{pmatrix}. \quad (4.193)$$

Les équations et contraintes de Pauli-Fierz sont alors équivalentes aux *équations de Rarita-Schwinger* [21] :

$$\boxed{(\gamma^{\mu} p_{\mu} - mc) \Psi_{\nu} = 0} \quad (4.194)$$

avec les contraintes

$$\boxed{\gamma^{\nu} \Psi_{\nu} = 0} \quad (4.195)$$

Preuve :

L'équation (4.194) est une conséquence directe des équations (4.185) avec la définition (4.178). Pour les contraintes (4.195), nous utilisons

$$(\sigma^{\mu} \chi_{\mu})_{\alpha} = \chi_{\mu}^{\dot{\beta}} (\sigma^{\mu})_{\alpha\dot{\beta}} = \frac{1}{2} \chi^{\rho\dot{\beta}\dot{\sigma}} (\sigma_{\mu})_{\rho\dot{\sigma}} (\sigma^{\mu})_{\alpha\dot{\beta}} = \chi^{\rho\dot{\beta}\dot{\sigma}} \epsilon_{\alpha\rho} \epsilon_{\dot{\beta}\dot{\sigma}} = 0. \quad (4.196)$$

Pour le dernier signe d'égalité nous utilisons que $\chi^{\rho\dot{\beta}\dot{\sigma}}$ est symétrique en $\dot{\beta}$ et $\dot{\sigma}$, tandis que ϵ est antisymétrique. L'avant-dernier signe d'égalité provient de Eq. (4.113). Pour $\hat{\sigma}^{\mu} \varphi_{\mu}$, on procède de la même façon. ■

Une conséquence directe de ces équations est la condition ⁵

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{1}{2} (\gamma^\mu p_\mu + mc) \gamma^\nu \Psi_\nu \\
&= \frac{1}{2} (\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} p_\mu - \gamma^\nu \gamma^\mu p_\mu + \gamma^\nu mc) \Psi_\nu \\
&= \frac{1}{2} (2g^{\mu\nu} p_\mu - \gamma^\nu [\gamma^\mu p_\mu - mc]) \Psi_\nu \\
&= p^\nu \Psi_\nu .
\end{aligned} \tag{4.197}$$

Cette équation est équivalente aux contraintes (4.187).

Inversement, les équations de Pauli-Fierz peuvent être dérivées des équations de Rarita-Schwinger en utilisant les relations

$$\varphi^{\alpha\rho\dot{\sigma}} = \varphi_\mu^\alpha (\sigma^\mu)^{\rho\dot{\sigma}} , \quad \chi^{\rho\dot{\beta}\dot{\sigma}} = \chi_\mu^\beta (\sigma^\mu)^{\rho\dot{\sigma}} . \tag{4.198}$$

Avec ces définitions, les équations de champ (4.187) sont évidemment satisfaites. Il faut encore vérifier les propriétés de symétrie des spineurs $\varphi_{\alpha\rho\dot{\sigma}}$ et $\chi_{\rho\dot{\beta}\dot{\sigma}}$. La symétrie en α et ρ de $\varphi_{\alpha\rho\dot{\sigma}}$ est équivalente à $\varphi^\rho_{\rho\dot{\sigma}} = 0$. Mais

$$\varphi^\rho_{\rho\dot{\sigma}} = \varphi_\mu^\rho (\sigma^\mu)_{\rho\dot{\sigma}} = (\hat{\sigma}^\mu)_{\dot{\sigma}\rho} \varphi_\mu^\rho = 0 . \tag{4.199}$$

Le dernier signe d'égalité résulte de la contrainte (4.195), tandis que l'avant dernier résulte simplement de $\sigma^\mu = (\hat{\sigma}^\mu)^T$. On peut procéder de même pour χ .

4.5 Algèbre de Dirac-Clifford, les termes covariants bi-linéaires

4.5.1 Algèbre de Dirac-Clifford

Définition 4.5.1 *Un espace vectoriel complexe (réel) \mathcal{A} est appelé une algèbre (associative) s'il existe une application*

$$\begin{aligned}
\cdot : \mathcal{A} \times \mathcal{A} &\rightarrow \mathcal{A} \\
(a, b) &\mapsto a \cdot b ,
\end{aligned} \tag{4.200}$$

avec les propriétés $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$, $a \cdot (b + c) = a \cdot b + a \cdot c$ et $a \cdot (\lambda b) = \lambda(a \cdot b)$ pour tout paramètre complexe (réel) λ et $a, b, c \in \mathcal{A}$.

Propriétés des matrices γ de Dirac

Les matrices de Dirac satisfont les propriétés suivantes :

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \mathbb{1}_4 \quad : \text{anti-commutativité} \tag{4.201}$$

$$(\gamma^0)^* = \gamma^0 , \quad (\gamma^0)^2 = \mathbb{1}_4 \quad : \text{hermiticité} \tag{4.202}$$

$$(\gamma^k)^* = -\gamma^k , \quad (\gamma^k)^2 = -\mathbb{1}_4 \quad : \text{anti-hermiticité} \tag{4.203}$$

$$\gamma^0 (\gamma^\mu)^* \gamma^0 = \gamma^\mu , \quad \mu = 0, k \quad : \text{réalité} \tag{4.204}$$

$$S(A)^{-1} \gamma^\mu S(A) = \Lambda(A)^\mu_{\nu} \gamma^\nu \quad : \text{transformation de Lorentz} \tag{4.205}$$

⁵Quelques propriétés des matrices de Dirac sont données dans l'Annexe A.4. En particulier, elles satisfont des règles d'anti-commutation, $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \mathbb{1}$.

La condition de réalité (4.204) se déduit de Eqs. (4.201), (4.202) et (4.203). D'autre part, $S(A)$ dénote les transformations de Lorentz d'un 4-spineur : $\Psi'(x') = S(A)\Psi(x)$ pour $x \rightarrow x' = \Lambda(A)x$ et $A \in SL(2, \mathbb{C})$. Finalement, il est très utile d'introduire encore la matrice γ^5 ,

$$\gamma_5 \equiv \gamma^5 := i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3. \quad (4.206)$$

Comme on peut le vérifier facilement, cette matrice satisfait les relations

$$\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0, \quad (\gamma^5)^2 = \mathbb{1}_4, \quad (\gamma^5)^* = -\gamma^0\gamma^5\gamma^0 = \gamma^5. \quad (4.207)$$

D'après la définition (4.206) et les propriétés (4.207), nous avons

$$\left[\frac{1}{2} (\mathbb{1}_4 \pm \gamma^5) \right]^2 = \frac{1}{2} (\mathbb{1}_4 \pm \gamma^5) \equiv P_{L,R}. \quad (4.208)$$

Les matrices $P_{L,R}$ sont donc hermitiennes et $P_{L,R}^2 = P_{L,R}$; ce sont alors des projections. Un spineur $\Psi(x)$ peut être décomposé en une partie "gauche", $\Psi_L(x)$, et une partie "droite", $\Psi_R(x)$, par :

$$\Psi_L = P_L \Psi = \frac{1}{2} (\mathbb{1}_4 + \gamma^5) \Psi, \quad \Psi_R = P_R \Psi = \frac{1}{2} (\mathbb{1}_4 - \gamma^5) \Psi. \quad (4.209)$$

Nous dirons d'un spineur qu'il est de *chiralité gauche* si $\Psi = P_L \Psi$ et de *chiralité droite* si $\Psi = P_R \Psi$. Nous verrons plus loin que ceci correspond à notre notion intuitive de chiralité : chiralité gauche (Left : L) ou hélicité positive si le spin est parallèle à la direction de propagation; et chiralité droite (Right : R) ou hélicité négative s'il est anti-parallèle. (*Exercice* : Montrer que les projections $P_{L,R}$ commutent avec l'évolution sous l'équation de Dirac seulement pour un spineur de masse $m = 0$.)

Les matrices $\tilde{\gamma}^\mu = T\gamma^\mu T^*$, obtenues par conjugaison avec une matrice unitaire $T \in U(4)$ quelconque, satisfont aussi aux conditions (4.201) à (4.207) si nous redéfinissons $\tilde{S}(A) = TS(A)T^*$. En redéfinissant aussi le spineur de Dirac par $\tilde{\Psi} = T\Psi$, ce dernier satisfait à l'équation de Dirac avec les matrices de Dirac transformées.

Par la suite, nous allons voir que toutes les "représentations" des règles d'anti-commutation en 4 dimensions sont de cette forme (et donc équivalentes).

Dans ce cours, nous avons besoin des deux représentations suivantes des matrices de Dirac :

Représentation de Weyl (représentation chirale)

C'est la représentation des matrices de Dirac introduite en (4.178),

$$(\gamma^\mu)_w = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\mu \\ \hat{\sigma}^\mu & 0 \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \hat{\sigma}^\mu = \epsilon \bar{\sigma}^\mu \epsilon^{-1} = \sigma_\mu. \quad (4.210)$$

Explicitement, nous avons donc

$$(\gamma^0)_w = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\gamma^k)_w = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \quad (\gamma^5)_w = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}. \quad (4.211)$$

Comme γ^5 est diagonal dans cette représentation, un spineur $\Psi = \begin{pmatrix} \varphi^\alpha \\ \chi^\beta \end{pmatrix}$ est projeté sur $\Psi_L = P_L \Psi = \begin{pmatrix} \varphi^\alpha \\ 0 \end{pmatrix}$ et $\Psi_R = P_R \Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi^\beta \end{pmatrix}$.

Un des avantages de la représentation de Weyl est que, dans cette représentation, les transformations de Lorentz $S(A)$ sont données par deux blocs invariants

$$S_w(A) := \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & \hat{A} \end{pmatrix}, \quad \hat{A} := \epsilon \bar{A} \epsilon^{-1}. \quad (4.212)$$

Les équations (4.211) et (4.212) impliquent que

$$\left[S_w(A), (\gamma^5)_w \right] = 0. \quad (4.213)$$

Dans cette représentation, la parité est de la forme

$$T_s = \begin{pmatrix} 0 & \Sigma \\ \Sigma^{-1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.214)$$

On vérifie facilement que $P_L T_s P_L = P_R T_s P_R = 0$. D'autre part, nous avons $P_R T_s P_L = T_s P_L$ et $P_L T_s P_R = T_s P_R$, ce qui revient à dire que l'opération de parité change la chiralité d'un spineur.

Dans la représentation de Weyl (aussi appelée la représentation chirale), la partie gauche du spineur est donnée par les deux premières composantes, φ^α , tandis que la partie droite correspond aux composantes 3 et 4, χ^β .

Représentation de Dirac-Pauli

Une autre représentation très utile est celle de Dirac-Pauli. Nous allons voir que, dans cette représentation, les deux premières composantes représentent l'électron et les deux dernières composantes correspondent au positron. La matrice de transformation de la représentation de Weyl dans celle de Dirac-Pauli est donnée par

$$T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{4 \times 4}, \quad (T^{-1} = T = T^*). \quad (4.215)$$

Les nouvelles matrices de Dirac sont

$$(\gamma^\mu)_{DP} := T (\gamma^\mu)_w T^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}^\mu + \sigma^\mu & \hat{\sigma}^\mu - \sigma^\mu \\ -(\hat{\sigma}^\mu - \sigma^\mu) & -(\hat{\sigma}^\mu + \sigma^\mu) \end{pmatrix}, \quad (4.216)$$

et

$$S_{DP}(A) = T S_w(A) T^* = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{A} + A & \hat{A} - A \\ -\hat{A} + A & -\hat{A} - A \end{pmatrix}. \quad (4.217)$$

Explicitement, les matrices de Dirac dans la représentation de Dirac-Pauli sont

$$(\gamma^0)_{DP} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}, \quad (\gamma^k)_{DP} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \quad (\gamma^5)_{DP} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.218)$$

Les représentations de Weyl et Dirac-Pauli peuvent être considérées comme des représentations équivalentes d'une algèbre abstraite : l'algèbre de Clifford $\mathbb{C}(n, g)$. Nous présentons deux définitions de cette algèbre, qui sont bien évidemment équivalentes.

Définition 4.5.2 L'algèbre de Clifford $\mathbb{C}(n, g)$ est l'algèbre complexe sur l'ensemble $\{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n\}$ modulo la relation $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu}\mathbb{I}$, où $g_{\mu\nu} \in GL(n, \mathbb{R})$ est une matrice symétrique non-dégénérée.

Définition 4.5.3 Soit (E, g) un espace vectoriel complexe avec une forme bilinéaire, symétrique, non-dégénérée, g . Soit $T(E)$ l'algèbre des tenseurs sur E ,

$$T(E) = \mathbb{C} \oplus E \oplus (E \otimes E) \oplus (E \otimes E \otimes E) \oplus \dots \quad (4.219)$$

En plus, soit $J \subset T(E)$, l'idéal généré par les éléments de la forme

$$x \otimes x - g(x, x)\mathbb{I}, \quad \forall x \in E. \quad (4.220)$$

Nous posons

$$\mathbb{C}(E, g) = T(E)/J. \quad (4.221)$$

Nous démontrons maintenant l'équivalence de ces deux définitions de l'algèbre de Clifford. Tout d'abord, nous notons que J contient aussi les éléments

$$\begin{aligned} & x \otimes y + y \otimes x - 2g(x, y)\mathbb{I} \\ &= (x + y) \otimes (x + y) - g(x + y, x + y)\mathbb{I} \\ & \quad - (x \otimes x - g(x, x)\mathbb{I}) - (y \otimes y - g(y, y)\mathbb{I}). \end{aligned} \quad (4.222)$$

Dans $\mathbb{C}(E, g)$, nous avons donc la relation

$$x \cdot y + y \cdot x = 2g(x, y)\mathbb{I} \quad (\cdot \text{ dénote le produit dans } \mathbb{C}(E, g)) \quad (4.223)$$

Nous choisissons une base $(\gamma_\mu)_{\mu=0}^{n-1}$ dans E . D'après Eq. (4.223), nous trouvons

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu}\mathbb{I} \quad \text{où} \quad g_{\mu\nu} := g(\gamma_\mu, \gamma_\nu). \quad (4.224)$$

Ceci démontre l'équivalence entre $\mathbb{C}(E, g)$ et $\mathbb{C}(n, g)$.

Les 2^n éléments γ_A définis par

$$\mathbb{I}, \gamma_\mu, \gamma_\mu\gamma_\nu \ (\mu < \nu), \gamma_\mu\gamma_\nu\gamma_\lambda \ (\mu < \nu < \lambda), \dots, \gamma_\mu\gamma_\nu \dots \gamma_{n-1}, \quad (4.225)$$

forment une base de l'espace vectoriel $\mathbb{C}(n, g)$. On peut démontrer que $\mathbb{C}(2m, g)$ possède une seule représentation irréductible (à équivalence près). Cette représentation est bijective et elle a la dimension $2m$ ⁶. Pour le cas $n = 2m = 4$ et $g = \text{diag}(+1, -1, -1, -1)$, nous parlons de l'algèbre de Dirac-Clifford et toute représentation irréductible de cette algèbre est équivalente à celle donnée par Eqs. (4.211) ou (4.218). Ce dernier énoncé n'est rien moins que le *théorème fondamental de Pauli* :

Théorème 4.5.1 (*Théorème fondamental de Pauli*) Soient données les matrices (γ_μ) et (γ'_μ) de type 4×4 qui satisfont à $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu}\mathbb{I} = \{\gamma'_\mu, \gamma'_\nu\}$. Alors, il existe une matrice $T \in GL(4, \mathbb{C})$ telle que

$$\gamma'_\mu = T\gamma_\mu T^{-1}. \quad (4.226)$$

⁶La situation est plus compliquée dans le cas d'une dimension impaire!

Un exemple est donné par Eq. (4.205), où $S(A)$ représente la transformation entre γ_μ et $\gamma'_\mu = \Lambda(A)_\mu{}^\nu \gamma_\nu$, qui satisfont aussi à $\{\gamma'_\mu, \gamma'_\nu\} = 2g_{\mu\nu} \mathbb{I}$ car $\Lambda(A)_\mu{}^\nu$ est une transformation de Lorentz, et donc

$$\begin{aligned} \{\gamma'_\mu, \gamma'_\nu\} &= \Lambda_\mu{}^\rho \Lambda_\nu{}^\sigma \{\gamma_\rho, \gamma_\sigma\} = 2\Lambda_\mu{}^\rho g_{\rho\sigma} \Lambda_\nu{}^\sigma \\ &= 2(\Lambda g \Lambda^T)_{\mu\nu} = 2g_{\mu\nu} . \end{aligned} \quad (4.227)$$

Un autre exemple est la matrice T donnée dans Eq. (4.215) qui relie la représentation de Weyl avec celle de Dirac-Pauli. Nous introduisons encore les matrices $\sigma^{\mu\nu}$ de l'algèbre de Dirac-Clifford :

$$\sigma^{\mu\nu} := \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] = i\gamma^\mu \gamma^\nu \quad (\mu \neq \nu) . \quad (4.228)$$

Ces matrices ont une signification physique simple : dans la représentation de Weyl, nous trouvons pour (i, j, k) cyclique

$$(\sigma^{ij})_w = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad (\sigma^{0k})_w = i \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & -\sigma_k \end{pmatrix} . \quad (4.229)$$

D'après les résultats de § 4.1, les $\frac{1}{2i}\sigma^{ij}$ sont les générateurs de la rotation autour de l'axe e_k , tandis que les $\frac{1}{2i}\sigma^{0k}$ sont les générateurs des boost dans la direction e_k . (Pour ceci, il faut se rappeler que $(\hat{\sigma}_k)^{\alpha\dot{\beta}} = -(\sigma_k)_{\alpha\dot{\beta}}$ et $(i\hat{\sigma}_k)^{\alpha\dot{\beta}} = (i\sigma_k)_{\alpha\dot{\beta}}$.)

4.5.2 Les combinaisons bi-linéaires

Soit $\Psi(x)$ un champ de Dirac. Nous dénotons par $\bar{\Psi}(x)$ son complexe conjugué, par $\Psi^*(x)$ son hermitien conjugué, et par $\Psi^\dagger(x)$ son adjoint, i.e.,

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} , \quad \Psi^*(x) = (\bar{\Psi}_1 \bar{\Psi}_2 \bar{\Psi}_3 \bar{\Psi}_4) , \quad \Psi^\dagger := \Psi^* \gamma^0 . \quad (4.230)$$

Avec le champ de Dirac et son adjoint, il est possible de former $4 \times 4 = 16$ combinaisons bi-linéaires. Ces dernières ont des propriétés de transformation simples sous transformation de Lorentz,

$$S(x) = \Psi^\dagger \Psi \quad (\text{scalaire}) \quad (4.231)$$

$$P(x) = \Psi^\dagger \gamma^5 \Psi \quad (\text{pseudo-scalaire}) \quad (4.232)$$

$$V^\mu(x) = \Psi^\dagger \gamma^\mu \Psi \quad (\text{vecteur}) \quad (4.233)$$

$$W^\mu(x) = \Psi^\dagger \gamma^\mu \gamma^5 \Psi \quad (\text{pseudo-vecteur}) \quad (4.234)$$

$$A^{\mu\nu}(x) = \Psi^\dagger \sigma^{\mu\nu} \Psi \quad (\text{tenseur antisymétrique}) \quad (4.235)$$

Pour vérifier que la loi de transformation indiquée entre parenthèses est correcte, nous rappelons que nous avons $(x' = \Lambda(A)x)$

$$\Psi'(x') = S(A)\Psi(x) , \quad (4.236)$$

$$\Psi'^\dagger(x') = \Psi^*(x)S^*(A)\gamma^0 = \Psi^\dagger(x)\gamma^0 S^*(A)\gamma^0 . \quad (4.237)$$

Dans la représentation de Weyl, Eqs. (4.210)–(4.213), nous obtenons avec $A^{-1} = (\hat{A})^*$ (cf. (4.106))

$$\gamma^0 S^*(A) \gamma^0 = S(A)^{-1} \quad \longrightarrow \quad \Psi^\dagger(x') = \Psi^\dagger(x) S(A)^{-1} . \quad (4.238)$$

En plus, $S(A)$ commute avec γ^5 . Ainsi, les scalaires se transforment comme $S(x') \rightarrow S(x)$ et $P(x') \rightarrow P(x)$. La quantité V^μ se transforme suivant

$$V'^\mu(x') = \Psi^\dagger(x) S(A)^{-1} \gamma^\mu S(A) \Psi(x) = \Lambda^\mu{}_\nu V^\nu(x) \quad (4.239)$$

et de même pour W^μ . La transformation du tenseur est laissée comme exercice.

D'autre part, Eq. (4.139) implique que la parité \mathcal{P} est représentée sur les spineurs de Dirac par

$$S(\mathcal{P}) = T_s = \begin{pmatrix} 0 & \Sigma \\ \Sigma^{-1} & 0 \end{pmatrix} , \quad (4.240)$$

avec $\Sigma^2 = \mathbb{I}_2$ et $\Sigma A \Sigma^{-1} = A$. Une solution pour Σ est $\Sigma = \pm \mathbb{I}_2$, donc

$$T_s = \pm \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_2 \\ \mathbb{I}_2 & 0 \end{pmatrix} = \pm \gamma^0 . \quad (4.241)$$

La transformation avec T_s laisse l'équation de Dirac invariante; en d'autres termes, si $\Psi(x)$ est une solution de l'équation de Dirac, $T_s \Psi(x)$ en sera une également. En utilisant $\{\gamma^\mu, \gamma^5\} = 0$, on trouve les transformations suivantes sous parité :

$$S = \Psi^\dagger \Psi \quad \longrightarrow \quad \Psi^* \gamma^{0*} \gamma^0 \gamma^0 \Psi = \Psi^* \gamma^0 \Psi = \Psi^\dagger \Psi = S , \quad (4.242)$$

$$P = \Psi^\dagger \gamma^5 \Psi \quad \longrightarrow \quad \Psi^* \gamma^{0*} \gamma^0 \gamma^5 \gamma^0 \Psi = -\Psi^\dagger \gamma^5 \Psi = -P , \quad (4.243)$$

$$V^\mu = \Psi^\dagger \gamma^\mu \Psi \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} \Psi^\dagger \gamma^0 \Psi & \text{si } \mu = 0 , \\ -\Psi^\dagger \gamma^k \Psi & \text{si } \mu = k , \end{cases} \quad (4.244)$$

$$W^\mu = \Psi^\dagger \gamma^\mu \gamma^5 \Psi \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} -W^0 & \text{si } \mu = 0 , \\ W^k & \text{si } \mu = k , \end{cases} \quad (4.245)$$

$$A^{\mu\nu} = \Psi^\dagger \sigma^{\mu\nu} \Psi \quad \longrightarrow \quad A^{\mu\nu} . \quad (4.246)$$

Les combinaisons bi-linéaires possibles sont données par la réduction du produit tensoriel

$$\begin{aligned} & \left(\mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 0)} \oplus \mathcal{D}^{(0, \frac{1}{2})} \right) \otimes \left(\mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, 0)} \oplus \mathcal{D}^{(0, \frac{1}{2})} \right) \\ &= \underbrace{2\mathcal{D}^{(0, 0)}}_{P, S} \oplus \underbrace{2\mathcal{D}^{(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})}}_{V^\mu, W^\mu} \oplus \underbrace{\mathcal{D}^{(0, 1)} \oplus \mathcal{D}^{(1, 0)}}_{A^{\mu\nu}} . \end{aligned} \quad (4.247)$$

D'après notre définition (4.235), $A^{\mu\nu}$ n'est pas irréductible sous \mathcal{L}_+^\uparrow . On peut encore décomposer $A^{\mu\nu}$ en sa partie auto-duale et anti-auto-duale. Ces dernières sont définies comme suit : soit $\epsilon^{\mu\nu\alpha\beta}$ le tenseur totalement anti-symétrique en quatre dimensions, avec $\epsilon^{0123} = +1$. Ce tenseur est invariant sous transformation de Lorentz propre et il change de signe sous parité (exercice). Pour un tenseur de rang 2, nous posons

$$* A^{\mu\nu} = \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} A_{\alpha\beta} . \quad (4.248)$$

Un tenseur s'appelle auto-dual ou anti-auto-dual si, respectivement, il satisfait

$$*A^{\alpha\beta} = A^{\beta\alpha} \quad \text{ou} \quad *A^{\alpha\beta} = -A^{\alpha\beta} . \quad (4.249)$$

On trouve $*(A^{\alpha\beta}) = A^{\alpha\beta}$. Tout tenseur se laisse décomposer en ses parties auto-duale et anti-auto-duale par

$$A^{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(A^{\alpha\beta} + *A^{\alpha\beta}) + \frac{1}{2}(A^{\alpha\beta} - *A^{\alpha\beta}) . \quad (4.250)$$

Avec $\epsilon^{\mu\nu\alpha\beta}$, ces parties sont invariantes sous transformation de Lorentz. La première se transforme avec $\mathcal{D}^{(1,0)}$ et la deuxième avec $\mathcal{D}^{(0,1)}$. La parité les échange.

4.6 L'équation de Dirac en présence d'un champ électromagnétique

Dans cette section, nous motivons la modification de l'équation de Dirac en présence d'un champ électromagnétique extérieur donné par son quadri-potential A^μ .

Le potentiel électromagnétique est composé d'un terme vectoriel $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ et d'un potentiel scalaire $\phi(t, \mathbf{x})$ qui forment un quadri-vecteur que nous désignons par $(A^\mu) = (\phi, \mathbf{A})$. En mécanique classique, l'hamiltonien d'un électron, charge $e < 0$, plongé dans un champ électromagnétique $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$ et $\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\partial_t \mathbf{A}$ est obtenu en remplaçant l'énergie E par $E - e\phi$, et l'impulsion spatiale \mathbf{p} par $\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$. Dans les unités $\hbar \equiv c \equiv 1$, la quadri-impulsion est alors substituée par

$$p_\mu \rightarrow p_\mu - eA_\mu . \quad (4.251)$$

Dirac a gardé cet Ansatz pour la mécanique quantique. Comme la règle de correspondance de Schrödinger requiert que p_μ devienne l'opérateur différentiel $i\partial_\mu$, nous obtenons

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu \equiv \partial_\mu + ieA_\mu \equiv (\partial_t + ie\phi, \nabla - ie\mathbf{A}) . \quad (4.252)$$

Ainsi, la dérivation ordinaire ∂_μ est remplacée par la "dérivation covariante" D_μ . En présence d'un champ électromagnétique, l'équation de Dirac (4.181) devient alors

$$\boxed{(-i\gamma^\mu D_\mu + m_e)\Psi = (\gamma^\mu [-i\partial_\mu + eA_\mu] + m_e)\Psi = 0} \quad (4.253)$$

L'hermitique conjuguée de cette équation est

$$[i\partial_\mu + eA_\mu]\Psi^*(\gamma^\mu)^* + m_e\Psi^* = 0 . \quad (4.254)$$

En multipliant à droite par γ^0 , et en utilisant la condition de réalité $\gamma^0(\gamma^\mu)^*\gamma^0 = \gamma^\mu$ et $(\gamma^0)^2 = \mathbb{1}$, ainsi que la définition $\Psi^\dagger = \Psi^*\gamma^0$, nous obtenons l'équation de Dirac adjointe

$$\boxed{(i\partial_\mu + eA_\mu)\Psi^\dagger\gamma^\mu + m_e\Psi^\dagger = 0} \quad (4.255)$$

Cette équation est évidemment équivalente à l'équation (4.253).

Multipliant Eq. (4.253) à gauche par Ψ^\dagger et Eq. (4.255) à droite par Ψ et soustrayant, permet de définir un courant j^μ qui est conservé :

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad \text{pour} \quad j^\mu = \Psi^\dagger \gamma^\mu \Psi . \quad (4.256)$$

D'après le théorème de Gauss, ceci implique (comme toujours) que

$$\|\Psi\|^2 := \int_{x^0=\text{cst}} d^3x \Psi^*(x)\Psi(x) \equiv \int_{x^0=\text{cst}} d^3x j^0(x) , \quad (4.257)$$

est indépendant du temps x^0 , et donc constant. Ceci nous permet d'interpréter $|\Psi|^2(x) = \Psi^*(x)\Psi(x)$ comme densité de probabilité dans l'espace, et $e|\Psi|^2(x)$ comme densité de charge.

4.6.1 Transformations de jauge

Changer la jauge du potentiel électromagnétique revient à remplacer les composantes de $A_\mu(x)$ par

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) + \partial_\mu \Gamma(x) , \quad (4.258)$$

où $\Gamma(x)$ est une fonction arbitrairement choisie des coordonnées de l'espace-temps. Or, nous savons que le champ électromagnétique $F_{\mu\nu} := \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ est invariant sous une telle transformation de jauge. Ainsi, l'équation de Dirac est aussi invariante si nous transformons le champ de Dirac suivant

$$\Psi(x) \mapsto e^{-ie\Gamma(x)} \Psi(x) . \quad (4.259)$$

Dans ce cas, nous trouvons $D_\mu \Psi \mapsto e^{-ie\Gamma} D_\mu \Psi$, et Eq. (4.253) reste valable (le côté gauche se multiplie simplement avec le facteur $e^{-ie\Gamma}$).

4.6.2 Equation de 2^{ème} ordre

Comme dans le cas sans champ électromagnétique extérieur, nous voulons également dériver une équation d'onde du deuxième ordre pour le champ de Dirac. Pour ceci, nous appliquons l'opérateur $(i\gamma^\mu D_\mu + m_e)$ sur l'équation de Dirac (4.253), ce qui donne

$$(\gamma^\mu \gamma^\nu D_\mu D_\nu + m_e^2) \Psi = 0 . \quad (4.260)$$

L'invariance sous transformations de Lorentz de cette équation est évidente. Afin de discuter son interprétation physique, il nous faut encore simplifier le terme de gauche. Pour cela, nous utilisons les propriétés des matrices de Dirac (cf. § A.4)

$$\begin{aligned} \gamma^\mu \gamma^\nu &= \frac{1}{2} \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} + \frac{1}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] = g^{\mu\nu} \mathbb{I}_4 - i\sigma^{\mu\nu} , \\ [\gamma^\mu, \gamma^\nu] D_\mu D_\nu &= [\gamma^\nu, \gamma^\mu] D_\nu D_\mu = -[\gamma^\mu, \gamma^\nu] D_\nu D_\mu = \frac{1}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] [D_\mu, D_\nu] , \\ [D_\mu, D_\nu] &= ie [A_\mu, \partial_\nu] + ie [\partial_\mu, A_\nu] = -ie (A_{\mu,\nu} - A_{\nu,\mu}) = ie F_{\mu\nu} , \\ \hookrightarrow \gamma^\mu \gamma^\nu D_\mu D_\nu &= g^{\mu\nu} D_\mu D_\nu + \frac{1}{2} e\sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} . \end{aligned} \quad (4.261)$$

Donc, Eq. (4.260) devient

$$\boxed{\left[(D^\mu D_\mu + m_e^2) \mathbb{1}_4 + \frac{1}{2} e F_{\mu\nu} \sigma^{\mu\nu} \right] \Psi = 0} \quad (4.262)$$

Cette équation est manifestement covariante. Comme souhaité, c'est une équation différentielle du deuxième ordre par rapport au temps, et qui se réduit à l'équation de Klein-Gordon, $(\square + m_e^2) \Psi = 0$, dans le cas du champ nul.

Le dernier terme de cette expression contient l'interaction du spin avec le champ électromagnétique extérieur. Ceci deviendra transparent dans la prochaine section où nous dériverons la limite non-relativiste de l'équation de Dirac.

4.7 Limite non-relativiste de l'équation de Dirac

Dans cette section, nous discutons la limite non-relativiste de l'équation de Dirac. En particulier, nous voulons faire le contact avec l'équation de Pauli du premier chapitre et (re-)trouver le facteur $g = 2$ pour l'électron et le bon facteur pour le couplage spin-orbite (facteur de Thomas). Pour discuter la limite non-relativiste, nous ré-insérons les facteurs c et \hbar dans cette section.

4.7.1 Une équation de Schrödinger

Tout d'abord, nous écrivons l'équation de Dirac (4.253) sous forme d'équation de Schrödinger,

$$i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi . \quad (4.263)$$

Pour ceci, nous multiplions Eq. (4.253) avec γ^0 et nous utilisons que $(\gamma^0)^2 = \mathbb{1}$. Puis, nous définissons les matrices

$$\alpha_k := \gamma^0\gamma^k , \quad \beta := \gamma^0 , \quad (4.264)$$

ce qui nous permet d'écrire l'hamiltonien sous la forme

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) + \beta m_e c^2 + e\phi\mathbb{1}_4 , \quad \phi \equiv A_0 . \quad (4.265)$$

Les matrices α_k et β satisfont aux relations

$$\{\alpha_j, \alpha_k\} = \alpha_j\alpha_k + \alpha_k\alpha_j = 2\delta_{jk} , \quad (4.266)$$

$$\{\alpha_j, \beta\} = \alpha_j\beta + \beta\alpha_j = 0 , \quad (4.267)$$

$$\beta^2 = \mathbb{1}_4 . \quad (4.268)$$

Dans une représentation qui obéit aux équations de réalité $\gamma^0(\gamma^\mu)^*\gamma^0 = \gamma^\mu$, les matrices $\boldsymbol{\alpha}$ et β sont hermitiennes.

- Représentation de Weyl (cf. Eqs. (4.210)–(4.213))

$$(\boldsymbol{\alpha})_w = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} , \quad (\beta)_w \equiv (\gamma^0)_w = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & 0 \end{pmatrix} . \quad (4.269)$$

- Représentation de Dirac-Pauli (cf. Eqs. (4.216)–(4.218))

$$(\boldsymbol{\alpha})_{DP} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} , \quad (\beta)_{DP} \equiv (\gamma^0)_{DP} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} . \quad (4.270)$$

La représentation de Dirac-Pauli est parfaitement adaptée à l'étude de la limite non-relativiste, et nous l'utiliserons ci-dessous. Nous posons encore

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} e^{-im_e c^2 t / \hbar} . \quad (4.271)$$

En insérant cet ansatz dans Eq. (4.263), Eqs. (4.265) et (4.270) nous permettent d'obtenir

$$(i\hbar\partial_t - e\phi)\varphi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\chi , \quad (4.272)$$

$$(i\hbar\partial_t - e\phi + 2m_e c^2)\chi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi . \quad (4.273)$$

4.7.2 Le facteur gyromagnétique : $\mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)$

Au premier ordre dans un développement non-relativiste, les termes $i\hbar\partial_t$ (\sim énergie cinétique) et $-e\phi$ (\sim énergie électrostatique) peuvent être négligés par rapport au terme $2m_e c^2$ sur le côté gauche de Eq. (4.273). Ceci implique alors

$$\chi = \frac{1}{2m_e c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi \quad \longrightarrow \quad \chi \propto \varphi \cdot \mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right) . \quad (4.274)$$

Nous introduisons cette approximation dans Eq. (4.272) et obtenons

$$(i\hbar\partial_t - e\phi)\varphi = \frac{1}{2m_e} \left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right]^2 \varphi . \quad (4.275)$$

Pour expliciter le membre de droite, nous utilisons que les vecteurs \mathbf{p} et \mathbf{A} commutent avec les matrices de Pauli, ainsi que l'identité (4.115),

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} \mathbb{1}_2 + i \sum_l \epsilon_{jkl} \sigma_l . \quad (4.276)$$

Ceci donne

$$\begin{aligned} \sigma_j \sigma_k \left(p_j - \frac{e}{c}A_j\right) \left(p_k - \frac{e}{c}A_k\right) \\ = \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - i \frac{e}{c} \sum_l \epsilon_{jkl} \sigma_l (p_j A_k + A_j p_k) , \\ = \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - i \frac{e}{c} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \wedge \mathbf{A}) . \end{aligned} \quad (4.277)$$

Comme $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ et $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$, nous obtenons

$$\left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right]^2 = \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e}{c} \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} . \quad (4.278)$$

Ainsi, Eq. (4.275) peut être écrite sous la forme $i\hbar\partial_t \varphi = H\varphi$ avec

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e\hbar}{2m_e c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + e\phi . \quad (4.279)$$

Ceci n'est rien d'autre que l'hamiltonien entrant dans l'équation de Pauli (1.157). D'après le Chapitre 1, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$ dénote le magnéton de Bohr de l'électron. La contribution du spin à l'hamiltonien est $H_s = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B}$, où $\boldsymbol{\mu}_e = g \frac{e}{2m_e c} \mathbf{S}$. Ici g

est appelé le facteur gyromagnétique. Si nous posons $\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$, la comparaison avec Eq. (4.279) implique

$$\boxed{g = 2} \quad (4.280)$$

Cette prédiction théorique du facteur gyromagnétique est en très bon accord avec les résultats expérimentaux. Ceci est un des plus importants succès de la théorie de Dirac.

Dans le cadre de la théorie des champs quantiques, ce résultat admet des corrections dues aux “boucles” (ordres supérieurs dans un calcul perturbatif) qui sont de l’ordre du pour mille. La différence entre la valeur calculée et la valeur mesurée est inférieure à 10^{-12} ; ceci représente un des accords les plus précis entre calcul théorique et valeur mesurée à ce jour.

Nous voulons encore retrouver les expressions non-relativistes pour la densité de probabilité ρ (1.158), et de courant \mathbf{j} (1.159). Dans la densité de probabilité, $\rho = \Psi^*\Psi = \varphi^*\varphi + \chi^*\chi$, nous pouvons négliger le deuxième terme, ce qui donne $\rho \simeq \varphi^*\varphi$. Pour la densité de courant, $j^k = c\Psi^\dagger\gamma^k\Psi = c\Psi^*\alpha^k\Psi$, nous obtenons

$$\mathbf{j} = c\Psi^*\boldsymbol{\alpha}\Psi = c(\varphi^*\boldsymbol{\sigma}\chi + \chi^*\boldsymbol{\sigma}\varphi) . \quad (4.281)$$

Pour éliminer χ de cette expression nous utilisons

$$\chi = \frac{1}{2m_e c} \left[-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] \boldsymbol{\sigma}\varphi , \quad (4.282)$$

$$\chi^* = \frac{1}{2m_e c} \left[i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right] \varphi^* \boldsymbol{\sigma} . \quad (4.283)$$

D’après Eq. (4.115), les identités suivantes sont satisfaites par un vecteur \mathbf{v} arbitraire :

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{v}) \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{v} - i\mathbf{v} \wedge \boldsymbol{\sigma} , \quad (4.284)$$

$$\boldsymbol{\sigma} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{v} + i\mathbf{v} \wedge \boldsymbol{\sigma} . \quad (4.285)$$

En insérant les expressions pour χ et χ^* dans Eq. (4.281), ces dernières relations nous permettent finalement d’obtenir

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m_e} [(\nabla\varphi^*)\varphi - \varphi^*\nabla\varphi] - \frac{e}{m_e c} \mathbf{A}\varphi^*\varphi + \frac{\hbar}{2m_e} \nabla \wedge (\varphi^* \boldsymbol{\sigma}\varphi) . \quad (4.286)$$

Ceci correspond exactement au résultat de Pauli, Eq. (1.159).

4.7.3 Le couplage spin-orbite : $\mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)^2$

Nous voulons aussi déterminer les effets des termes d’ordres $\mathcal{O}(v/c)^2$. Pour ceci nous considérons le cas simplifié avec $\mathbf{A} = 0$. Pour la densité de probabilité, nous obtenons (avec inclusion du terme $\chi^*\chi$ et en posant $\mathbf{A} = 0$ dans Eq. (4.274))

$$\rho = \Psi^*\Psi = |\varphi|^2 + \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} |\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\varphi|^2 + \mathcal{O}(v/c)^4 . \quad (4.287)$$

Pour obtenir une équation de Schrödinger qui soit une approximation de l’équation de Dirac jusqu’au deuxième ordre, il est nécessaire d’introduire une autre fonction d’onde à deux composantes, notée ζ , pour laquelle nous avons

$$\int d^3x |\zeta|^2 = \int d^3x \rho = \int d^3x \left[|\varphi|^2 + \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} |\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\varphi|^2 \right] . \quad (4.288)$$

Pour le deuxième terme, une intégration par partie donne

$$\begin{aligned} \int d^3x (\nabla\varphi^* \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\varphi) &= - \int d^3x \varphi^* (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla) \varphi \\ &= - \int d^3x \varphi^* \Delta\varphi \\ &= -\frac{1}{2} \int d^3x [\varphi^* \Delta\varphi + (\Delta\varphi^*)\varphi] . \end{aligned} \quad (4.289)$$

Insérant ce résultat dans Eq. (4.288), nous obtenons

$$\int d^3x |\zeta|^2 = \int d^3x \left[\left| \varphi - \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \Delta\varphi \right|^2 + \mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)^4 \right] . \quad (4.290)$$

Ainsi, on a finalement

$$\zeta = \varphi - \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \Delta\varphi + \mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)^4 = \left[1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m_e^2 c^2} \right] \varphi + \mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)^4 , \quad (4.291)$$

$$\varphi = \left[1 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m_e^2 c^2} \right] \zeta + \mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)^4 . \quad (4.292)$$

Pour simplifier les notations, nous considérons un état stationnaire tel que

$$i\hbar\partial_t\chi = \epsilon\chi , \quad i\hbar\partial_t\varphi = \epsilon\varphi , \quad (4.293)$$

où $\epsilon = E - m_e c^2$ est l'énergie de l'électron soustraite de son énergie au repos ($m_e c^2$), qui est déjà incluse dans le facteur $e^{-im_e c^2 t/\hbar}$ de Eq. (4.271). Pour $\mathbf{A} = 0$, les équations (4.272) et (4.273) deviennent alors

$$(\epsilon - e\phi)\varphi = c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\chi , \quad (4.294)$$

$$(\epsilon - e\phi + 2m_e c^2)\chi = c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi , \quad (4.295)$$

ce qui implique

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{1}{2m_e c} \left[1 + \frac{\epsilon - e\phi}{2m_e c^2} \right]^{-1} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi \\ &\simeq \frac{1}{2m_e c} \left[1 - \frac{\epsilon - e\phi}{2m_e c^2} \right] (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi . \end{aligned} \quad (4.296)$$

Nous introduisons cette expression dans Eq. (4.294) :

$$(\epsilon - e\phi)\varphi = \frac{1}{2m_e} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \left[1 - \frac{\epsilon - e\phi}{2m_e c^2} \right] (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi . \quad (4.297)$$

En remplaçant φ par ζ , nous trouvons (en négligeant tous les termes d'ordre $\mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)^4$) que $\epsilon\zeta = H\zeta$, où

$$\boxed{H = e\phi + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3 c^2} + \frac{e}{4m_e^2 c^2} \left[(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\phi(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) - \frac{1}{2} (\mathbf{p}^2\phi + \phi\mathbf{p}^2) \right]} \quad (4.298)$$

Pour ceci, nous avons aussi utilisé que, à l'ordre le plus bas,

$$\epsilon = e\phi + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + \mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)^2 . \quad (4.299)$$

Dérivation détaillée de Eq. (4.298) :

Notre point de départ est l'équation (4.297) pour φ . Nous utilisons que $\epsilon = i\hbar\partial_t$ commute avec \mathbf{p} et $\boldsymbol{\sigma}$, ainsi que l'identité $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2$. Alors, Eq. (4.297) peut être mise sous la forme

$$\underbrace{\epsilon\varphi}_{T_1} = \underbrace{\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + e\phi \right]}_{T_2} \varphi - \underbrace{\frac{\mathbf{p}^2}{4m_e^2 c^2} \epsilon\varphi}_{T_3} + \underbrace{\frac{e}{4m_e^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \varphi}_{T_4}. \quad (4.300)$$

A l'ordre le plus bas dans un développement relativiste, les équations (4.291)–(4.292) et (4.299) impliquent

$$\varphi = \zeta, \quad \epsilon\varphi = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + e\phi \right] \varphi. \quad (4.301)$$

Comme première approximation, il est donc légitime d'insérer ces expressions dans les termes T_3 et T_4 . A l'ordre suivant, $\varphi = \left(1 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m_e^2 c^2}\right)\zeta$. Nous adoptons cette substitution dans les termes dominants, T_1 et T_2 . Cela donne

$$\begin{aligned} \epsilon\zeta &= \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + e\phi \right) \zeta + \frac{\mathbf{p}^2}{8m_e^2 c^2} \epsilon\zeta - \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + e\phi \right) \frac{\mathbf{p}^2}{8m_e^2 c^2} \zeta \\ &\quad - \frac{\mathbf{p}^2}{4m_e^2 c^2} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + e\phi \right) \zeta + \frac{e}{4m_e^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \zeta. \end{aligned} \quad (4.302)$$

En remplaçant encore $\epsilon\zeta = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + e\phi\right)\zeta$ dans $\frac{\mathbf{p}^2}{8m_e^2 c^2} \epsilon\zeta$, nous obtenons la formule (4.298).

Nous réécrivons encore le terme [] de Eq. (4.298) :

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) &= \left[\delta_{ij} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k \right] p_i \phi p_j \\ &= i\hbar \mathbf{E} \cdot \mathbf{p} + \phi \mathbf{p}^2 - \hbar (\mathbf{E} \wedge \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \end{aligned} \quad (4.303)$$

où nous avons utilisé pour la deuxième égalité que $p_i \phi p_j = i\hbar E_i p_j + \phi p_i p_j$, avec $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ le champ électrique. D'autre part, nous avons

$$\begin{aligned} \mathbf{p}^2 \phi - \phi \mathbf{p}^2 &= -\hbar^2 [\nabla^2 \phi - \phi \nabla^2] = -\hbar^2 [\nabla \cdot (\nabla \phi) + 2(\nabla \phi) \cdot \nabla] \\ &= -\hbar^2 [-(\nabla \cdot \mathbf{E}) - 2\mathbf{E} \cdot \nabla] = \hbar^2 \nabla \cdot \mathbf{E} + 2i\hbar \mathbf{E} \cdot \mathbf{p}. \end{aligned} \quad (4.304)$$

En combinant ces résultats, nous obtenons

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) - \frac{1}{2} (\mathbf{p}^2 \phi + \phi \mathbf{p}^2) = -\hbar (\mathbf{E} \wedge \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} - \frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \mathbf{E}. \quad (4.305)$$

A l'ordre $\mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)^2$, les corrections relativistes dans l'hamiltonien (4.298) peuvent donc s'écrire sous la forme

$$\boxed{H = e\phi + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3 c^2} - \frac{e\hbar}{4m_e^2 c^2} (\mathbf{E} \wedge \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} - \frac{e\hbar^2}{8m_e^2 c^2} (\nabla \cdot \mathbf{E})} \quad (4.306)$$

Les trois derniers termes sont les corrections d'ordre $\mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right)^2$:

- Le terme $-\frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3c^2}$ correspond simplement à la première correction relativiste du terme d'énergie cinétique de l'électron, $\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}$, quand on considère l'expansion

$$\epsilon = E - m_e c^2 = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_e^2 c^2} - m_e c^2 \simeq \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3 c^2} + \dots \quad (4.307)$$

- Le terme $-\frac{e\hbar}{4m_e^2 c^2} (\mathbf{E} \wedge \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = H_{so}$ correspond au couplage spin-orbite, i.e., l'interaction d'un moment magnétique en mouvement avec le champ électrique. Il a le correct facteur de Thomas, i.e, 1/2 (cf. § 2.2.3). En effet, pour un champ électrique de symétrie sphérique $\mathbf{E} = -\frac{\mathbf{x}}{r} \frac{d\phi}{dr}$, l'hamiltonien correspondant au couplage spin-orbite devient

$$H_{so} = \frac{e\hbar}{4m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} (\mathbf{x} \wedge \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{e}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (4.308)$$

où $\mathbf{L} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$ est le moment cinétique orbital et $\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$ est le spin. Ceci correspond bien à Eq. (2.55).

- Découvert par Darwin (1928), le dernier terme est une correction relativiste au potentiel central (cf. aussi § 2.2.3). Il est non-nul uniquement à l'intérieur des sources du champ électrique. Pour un potentiel coulombien $V = -Ze^2/r$, le terme de Darwin est égal à $\frac{\pi Ze^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} \delta(\mathbf{x})$; seuls les états s sont affectés.

4.8 La structure fine de l'atome d'hydrogène

La contribution des trois termes relativistes est à l'origine d'un déplacement et d'un dédoublement des lignes atomiques (par rapport aux niveaux non-relativistes), qui est appelé *la structure fine* des spectres atomiques. Nous avons déjà calculé le dédoublement dû au couplage spin-orbite, H_{so} . Ici, nous voulons déterminer l'effet total des trois termes qui génèrent la structure fine pour des atomes possédant un unique électron. Dans le potentiel central coulombien $V = e\phi = -Ze^2/r$, nous avons

$$H = H^{(0)} + H^{(P)} \quad (4.309)$$

$$H^{(0)} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} \quad (4.310)$$

$$H^{(P)} = -\frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3} + \frac{\alpha Z}{2r^3 m_e^2} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \frac{\alpha Z \pi}{2m_e^2} \delta^3(\mathbf{x}) \quad (4.311)$$

Nous avons choisi les unités $\hbar = c = 1$ de sorte que $\alpha = e^2$. Soit Ψ_{njl} une solution de l'équation de Schrödinger non-relativiste (voir Annexe A.3.1). Si on dénote par ϵ_0 son énergie non-perturbée et par $\Delta\epsilon$ le déplacement de cette

solution, on a (cf. Chapitre 2)

$$\epsilon_0 = -\frac{\alpha^2 Z^2 m_e}{2n^2}, \quad (4.312)$$

$$\begin{aligned} \Delta\epsilon = & -\frac{1}{8m_e^2} \langle \mathbf{p}^4 \rangle_{nj\ell} + \frac{\alpha Z \pi}{2m_e^2} |\Psi_{nj\ell}(0)|^2 \\ & + \frac{\alpha Z}{2m_e^2} \cdot \begin{cases} \frac{1}{2} [j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}] \langle \frac{1}{r^3} \rangle_{nj\ell} & \text{si } \ell \neq 0, \\ 0 & \text{si } \ell = 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.313)$$

Nous utilisons encore que

$$\mathbf{p}^2 \Psi_{nj\ell} = 2m_e (\epsilon_0 + Z\alpha/r) \Psi_{nj\ell}, \quad (4.314)$$

et donc

$$\langle \mathbf{p}^4 \rangle = 4m_e^2 \langle (\epsilon_0 + Z\alpha/r)^2 \rangle_{nj\ell}. \quad (4.315)$$

Toutes les moyennes qui apparaissent peuvent être calculées en utilisant certaines identités des polynômes de Laguerre. Nous donnons ici seulement les résultats :

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nj\ell} = \frac{\alpha Z m_e}{n^2}, \quad (4.316)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nj\ell} = \frac{(\alpha Z m_e)^2}{n^3(\ell + 1/2)}, \quad (4.317)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nj\ell} = \frac{(\alpha Z m_e)^3}{n^3 \ell(\ell + 1/2)(\ell + 1)}, \quad \ell \neq 0. \quad (4.318)$$

Avec

$$|\Psi(0)|^2 = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \frac{(\alpha Z m_e)^3}{n^3} & \text{si } \ell = 0, \\ 0 & \text{si } \ell \neq 0, \end{cases} \quad (4.319)$$

on obtient finalement une formule qui est valable pour toutes les valeurs de $\ell = j \pm \frac{1}{2}$:

$$\Delta\epsilon = -\frac{(\alpha Z)^4 m_e}{2n^3} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (4.320)$$

Ce déplacement ne lève la dégénérescence des niveaux que partiellement. Les états avec des valeurs de $\ell = j \pm \frac{1}{2}$ différentes pour des j et n fixés restent dégénérés. Les états de nombre quantique principal n fixe se séparent en n niveaux distincts avec $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - \frac{1}{2}$. La dégénérescence arbitraire qui reste est levée dans le cadre de la théorie des champs quantiques par le déplacement de Lamb (Lambshift).

4.9 Solutions de l'équation de Dirac libre

Dans cette section, nous examinons les solutions de l'équation de Dirac en l'absence de champ extérieur. Pour cette étude, nous considérons la représentation de Dirac-Pauli, et posons $\hbar \equiv c = 1$.

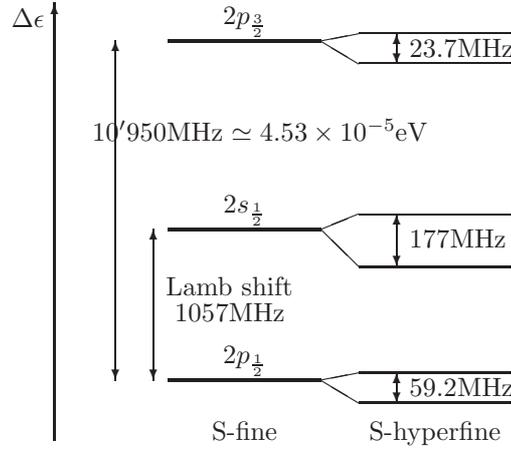


FIG. 4.1 – Structure fine et structure hyperfine du niveau $n = 2$ de l’atome d’hydrogène : $-\epsilon_0 = 3.4\text{eV} = 1.3 \times 10^8\text{MHz}$, où $1\text{eV} \simeq 2.4 \times 10^8\text{MHz}$. L’écart entre les niveaux $2s_{\frac{1}{2}}$ et $2p_{\frac{1}{2}}$ est le déplacement de Lamb, qui est environ dix fois plus petit que l’intervalle de structure fine qui sépare les deux niveaux $2p_{\frac{3}{2}}$ et $2p_{\frac{1}{2}}$. Lorsque l’on tient compte du couplage hyperfin, chaque niveau se scinde encore en deux sous-niveaux (voir Chapitre 2).

4.9.1 Ondes planes

En l’absence de champ extérieur, l’équation de Dirac (4.253) et son adjointe (4.255) se réduisent à, respectivement,

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\Psi = 0, \quad (4.321)$$

$$i\partial_\mu \Psi^\dagger \gamma^\mu + m\Psi^\dagger = 0. \quad (4.322)$$

Nous recherchons des solutions de l’équation de Dirac de la forme

$$\Psi_{+p}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\epsilon}} u_{+p}(\mathbf{p}) e^{-ipx} \quad \text{avec } \epsilon := p^0 > 0, \quad (4.323)$$

$$\Psi_{-p}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\epsilon}} u_{-p}(\mathbf{p}) e^{ipx} \quad \text{avec } -p^0 = -\epsilon < 0. \quad (4.324)$$

Les spineurs $u_{\pm p}(\mathbf{p})$ possèdent quatre composantes et ne dépendent pas de \mathbf{x} . D’autre part, $p \in \mathbb{R}^4$ avec $(p^0)^2 - \mathbf{p}^2 = m^2$ et $px \equiv p_\mu x^\mu = p^0 x^0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}$.

La solution Ψ_{-p} porte l’énergie $-p^0 = -\epsilon < 0$. Nous avons donc retrouvé les solutions à énergie négative que Dirac a voulu contourner en remplaçant l’équation de Klein-Gordon par une équation du premier ordre.

Pour que les “Ansätze” (4.323) et (4.324) soient solutions de l’équation de Dirac (4.321), les spineurs $u_{\pm p}$ doivent satisfaire aux équations algébriques

$$(\gamma^\mu p_\mu - m)u_{+p} = 0, \quad (\gamma^\mu p_\mu + m)u_{-p} = 0. \quad (4.325)$$

De manière similaire, Eq. (4.322) impose des contraintes algébriques sur les spineurs adjoints, $u_{\pm p}^\dagger = u_{\pm p}^* \gamma^0$:

$$u_{+p}^\dagger (\gamma^\mu p_\mu - m) = 0, \quad u_{-p}^\dagger (\gamma^\mu p_\mu + m) = 0. \quad (4.326)$$

La normalisation de ces spineurs est choisie telle que

$$u_{+p}^\dagger u_{+p} = 2m, \quad u_{-p}^\dagger u_{-p} = -2m \quad \text{pour } p^0 > 0. \quad (4.327)$$

La multiplication $u_{\pm p}^\dagger \cdot (4.325)$ (ou la multiplication $(4.326) \cdot u_{\pm p}$) permet d'obtenir un invariant relativiste,

$$u_{\pm p}^\dagger \gamma^\mu u_{\pm p} p_\mu = \pm m u_{\pm p}^\dagger u_{\pm p} = 2m^2 = 2p^\mu p_\mu. \quad (4.328)$$

Cette identité est vérifiée dans tout référentiel, et nous avons, pour $m \neq 0$,

$$u_{\pm p}^\dagger \gamma^\mu u_{\pm p} = 2p^\mu. \quad (4.329)$$

Pour la densité de courant, $j^\mu := \Psi^\dagger \gamma^\mu \Psi$, nous obtenons

$$j^\mu = \Psi_{\pm p}^\dagger \gamma^\mu \Psi_{\pm p} = \frac{1}{2\epsilon} u_{\pm p}^\dagger \gamma^\mu u_{\pm p} = \frac{1}{\epsilon} p^\mu, \quad (4.330)$$

avec $j = (1, \mathbf{v})$ où $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{\epsilon}$ est la vitesse de la particule. Ceci justifie notre choix pour la normalisation des spineurs.

Pour décrire les spineurs à quatre composantes, nous introduisons

$$u = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (4.331)$$

Pour les états d'énergie positive, Eq. (4.321) (dans la représentation de Dirac-Pauli) implique

$$(p^0 - m) \varphi - \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \chi = 0, \quad (4.332)$$

$$(p^0 + m) \chi - \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \varphi = 0. \quad (4.333)$$

Les relations entre φ et χ sont alors

$$\varphi = \frac{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{p^0 - m} \chi \quad \text{et} \quad \chi = \frac{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{p^0 + m} \varphi. \quad (4.334)$$

Dans la limite non-relativiste (où $\epsilon - m \simeq \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \ll \epsilon + m \simeq 2m$) et pour les états d'énergie positive ($p^0 = \epsilon > 0$), on a $|\varphi| \gg |\chi|$. L'inégalité contraire est obtenue pour les états d'énergie négative. Notons encore que les équations (4.334) sont équivalentes : en multipliant la première par $\frac{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{\epsilon + m}$ à gauche, on obtient la deuxième si on utilise les identités $\epsilon^2 - m^2 = \mathbf{p}^2$ et $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2$.

Soient $v, v' \in \mathbb{C}^2$ des vecteurs arbitraires. On peut alors écrire

$$u_{+p} = \begin{pmatrix} \sqrt{\epsilon + m} v \\ \sqrt{\epsilon - m} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) v \end{pmatrix}. \quad (4.335)$$

De même, on obtient pour les états d'énergie négative

$$u_{-p} = \begin{pmatrix} \sqrt{\epsilon - m} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) v' \\ \sqrt{\epsilon + m} v' \end{pmatrix}, \quad (4.336)$$

où nous avons introduit $\mathbf{n} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$. Si $v^* v = v'^* v' = 1$, ces spineurs satisfont aux équations de Dirac (4.325) et ont la normalisation souhaitée, Eq. (4.327).

Les deux degrés de liberté du vecteur $v \in \mathbb{C}^2$ sont les deux composantes du spin. Mais l'hamiltonien $H = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m$ ne commute pas avec l'opérateur de spin,

$$\Sigma_j := \begin{pmatrix} \sigma_j & 0 \\ 0 & \sigma_j \end{pmatrix} = \sigma^{lm}, \quad (lmj \text{ cyclique}) \quad (4.337)$$

Donc, en général, la composante du spin en direction \mathbf{e}_z n'est pas conservée. Mais l'hélicité, donnée par $\frac{1}{2}\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma}$, commute avec H . On peut donc choisir des états propres de l'hélicité comme base

$$\frac{1}{2}(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})v^{(\lambda)} = \lambda v^{(\lambda)}, \quad \lambda = \pm 1/2. \quad (4.338)$$

Dans la théorie des champs quantiques, on montre que u_p décrit un électron, tandis que u_{-p} décrit un positron de même énergie et impulsion, pour $p^0 = \epsilon > 0$. Comme nous le verrons dans le paragraphe § 4.10, l'opérateur de conjugaison de charge transforme u_{+p} en u_{-p}^\dagger . Une solution arbitraire de l'équation de Dirac libre peut toujours être décrite comme une superposition de spineurs Ψ_p :

$$\Psi(x) = \int \frac{d^3p}{\sqrt{2\epsilon}} (a_p u_{+p} e^{-ipx} + \bar{b}_p u_{-p} e^{ipx}), \quad (4.339)$$

où le premier terme décrit les états d'énergie positive (électrons), tandis que le deuxième décrit les états d'énergie négative (positrons).

4.9.2 Ondes sphériques de diffusion

Pour discuter des processus de diffusion, il est souvent beaucoup plus astucieux de travailler avec des ondes sphériques (l'onde diffusée est une onde sphérique, principe de Huygens!). Nous cherchons donc des solutions radiales de

$$H\Psi = \epsilon\Psi, \quad H = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m. \quad (4.340)$$

L'hamiltonien H commute avec les opérateurs qui génèrent les rotations. Les rotations $A \in SU(2)$ agissent sur $\Psi(x)$ d'après

$$[\mathcal{U}(A)\Psi](x) = S(A)\Psi(\Lambda(A^{-1})x), \quad (4.341)$$

et elles sont générées par les opérateurs $\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}$, $\mathbf{n} \in \mathbb{R}^3$, où $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, $\mathbf{L} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$ et

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \Sigma_k = \sigma^{ij} \quad (i, j, k \text{ cyclique}). \quad (4.342)$$

Finalement, l'hamiltonien H commute avec la parité \mathcal{U}_p ,

$$[\mathcal{U}_p\Psi](x^0, \mathbf{x}) = \gamma^0\Psi(x^0, -\mathbf{x}), \quad \mathcal{U}_p^2 = \mathbb{1}_4. \quad (4.343)$$

Nous cherchons des solutions de Eq. (4.340) qui sont invariantes sous \mathbf{J}^2 , J_z et \mathcal{U}_p , i.e., qui sont des vecteurs propres de ces opérateurs. Tout d'abord, nous réécrivons l'opérateur $\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} = -i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla$. Pour ceci, nous utilisons l'identité (exercice)

$$\nabla = \underbrace{\hat{\mathbf{x}}(\hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla)}_{\text{partie radiale}} - \underbrace{\hat{\mathbf{x}} \wedge (\hat{\mathbf{x}} \wedge \nabla)}_{\text{partie angulaire}} = \hat{\mathbf{x}}\partial_r - \frac{i}{r}\hat{\mathbf{x}} \wedge \mathbf{L}. \quad (4.344)$$

où $\hat{\mathbf{x}} := \mathbf{x}/r$. Ceci donne alors

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} = (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \partial_r - \frac{i}{r} \boldsymbol{\alpha} \cdot (\hat{\mathbf{x}} \wedge \mathbf{L}) . \quad (4.345)$$

Dans la représentation de Dirac-Pauli, nous avons

$$\gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_2 \\ \mathbb{I}_2 & 0 \end{pmatrix} , \quad \alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} = \gamma^5 \Sigma_k . \quad (4.346)$$

Nous utilisons encore Eq. (4.115), i.e., $\Sigma_j \Sigma_k = \delta_{jk} + i \epsilon_{jkl} \Sigma_l$. Alors, comme $\hat{\mathbf{x}}$ et \mathbf{L} sont orthogonaux, nous avons

$$(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\mathbf{x}}) (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}) = i \boldsymbol{\Sigma} \cdot (\hat{\mathbf{x}} \wedge \mathbf{L}) , \quad (4.347)$$

ou, après multiplication à gauche par γ^5 ,

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{x}}) (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}) = i \boldsymbol{\alpha} \cdot (\hat{\mathbf{x}} \wedge \mathbf{L}) . \quad (4.348)$$

Insérant cette identité dans Eq. (4.345), nous obtenons

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} = (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \left[\partial_r - \frac{1}{r} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} \right] = \gamma^5 (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \left[\partial_r - \frac{1}{r} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} \right] . \quad (4.349)$$

Donc, l'hamiltonien s'écrit

$$H = -i \gamma^5 (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \left[\partial_r + \frac{1}{r} - \frac{1}{r} (1 + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}) \right] + \beta m . \quad (4.350)$$

Une dernière simplification est obtenue en utilisant $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma}$. Ceci implique $\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \frac{3}{4}$, et donc $1 + \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 + \frac{1}{4}$. Finalement, l'hamiltonien est

$$H = -i \gamma^5 (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \left[\partial_r + \frac{1}{r} - \frac{1}{r} \left(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 + \frac{1}{4} \right) \right] + \beta m . \quad (4.351)$$

Pour la suite, nous décomposons le champ de Dirac en bi-spineurs,

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} . \quad (4.352)$$

Comme $\beta = \gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{I}_2 \end{pmatrix}$ dans la représentation de Dirac-Pauli, nous pouvons écrire

$$\frac{1}{2} (\mathbb{I}_4 + \beta) \Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \frac{1}{2} (\mathbb{I}_4 - \beta) \Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} . \quad (4.353)$$

Nous supposons que Ψ soit fonction propre de \mathbf{J}^2 , J_z et $U_{\mathcal{P}}$ où

$$\mathbf{J}^2 \Psi = j(j+1) \Psi , \quad J_z \Psi = m \Psi , \quad U_{\mathcal{P}} \Psi = (-1)^{j+\eta/2} \Psi , \quad (4.354)$$

avec

$$\eta = \begin{cases} +1 & \text{si la parité est } (-1)^{j+1/2} , \\ -1 & \text{si la parité est } (-1)^{j-1/2} . \end{cases} \quad (4.355)$$

De l'équation (4.343), il vient que

$$\varphi(-\mathbf{x}) = (-1)^{j+\eta/2} \varphi(\mathbf{x}) \quad \text{et} \quad \chi(-\mathbf{x}) = -(-1)^{j+\eta/2} \chi(\mathbf{x}), \quad (4.356)$$

Donc φ et χ ont des parités opposées. Pour continuer, nous devons définir les harmoniques sphériques spinorielles :

$$\Omega_{\ell_j}^m(\hat{\mathbf{x}}) := \sum_{m_\ell, m_s} \langle \ell, m_\ell, 1/2, m_s | j, m \rangle Y_{\ell, m_\ell}(\hat{\mathbf{x}}) \chi_{m_s}, \quad (4.357)$$

où $\langle \ell, m_\ell, 1/2, m_s | j, m \rangle$ sont les coefficients de Clebsch-Gordan (cf. Eq. (4.383)) et

$$\chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.358)$$

est la base usuelle des spineurs de Pauli. Les $\Omega_{\ell_j}^m$ ont la même parité que Y_{ℓ, m_ℓ} , i.e., $(-1)^\ell$. Bien sûr, les seules valeurs possibles pour ℓ sont $\ell = j \pm 1/2$. Comme φ et χ sont de parité opposée, une solution de l'équation de Dirac avec moment cinétique j , nombre magnétique m et parité $(-1)^{j+\eta/2}$ est de la forme

$$\Psi_{jm}^\eta = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G(r) \Omega_{\ell_j}^m(\hat{\mathbf{x}}) \\ iF(r) \Omega_{\ell'_j}^m(\hat{\mathbf{x}}) \end{pmatrix}, \quad (4.359)$$

où $\ell = j + \eta/2$ et $\ell' = j - \eta/2$.

Il nous reste à déterminer les fonctions radiales $G(r)$ et $F(r)$. Nous calculons tout d'abord l'action de $1 + \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 + \frac{1}{4}$ sur Ψ_{jm}^η . Sur le bi-spineur φ , nous avons

$$\begin{aligned} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 + \frac{1}{4}) \varphi &= [j(j+1) - \ell(\ell+1) + \frac{1}{4}] \varphi \\ &= [j(j+1) - (j + \frac{\eta}{2})(j + 1 + \frac{\eta}{2}) + \frac{1}{4}] \varphi \\ &= -(2j+1) \frac{\eta}{2} \varphi. \end{aligned} \quad (4.360)$$

De manière similaire, l'action sur le bi-spineur χ donne

$$\begin{aligned} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 + \frac{1}{4}) \chi &= [j(j+1) - \ell'(\ell'+1) + \frac{1}{4}] \chi \\ &= [j(j+1) - (j - \frac{\eta}{2})(j + 1 - \frac{\eta}{2}) + \frac{1}{4}] \chi \\ &= (2j+1) \frac{\eta}{2} \chi. \end{aligned} \quad (4.361)$$

Nous pouvons condenser ces deux résultats sous la forme

$$(1 + \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\Sigma}) \Psi_{jm}^\eta = -\frac{\eta}{2} (2j+1) \beta \Psi_{jm}^\eta. \quad (4.362)$$

Avec ceci, l'équation de Schrödinger avec hamiltonien (4.351) se réduit à

$$\left\{ -i\gamma^5 (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \left[\partial_r + \frac{1}{r} + \frac{\eta(2j+1)}{2r} \beta \right] + m\beta \right\} \Psi_{jm}^\eta = \epsilon \Psi_{jm}^\eta. \quad (4.363)$$

Pour évaluer l'action de $(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\mathbf{x}})$ sur Ψ_{jm}^η , nous notons que $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{x}})$ est un pseudo-scalaire. Ainsi $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \Omega_{\ell_j}^m(\hat{\mathbf{x}})$ a le même moment cinétique que $\Omega_{\ell_j}^m$, mais sa parité

est opposée. Ce terme est alors proportionnel à $\Omega_{\ell'j}^m$, puisque $(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{x}})^2 = \mathbb{1}$ doit être une pure phase, $e^{i\delta}$. Nous pouvons donc écrire

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{x}})\Omega_{\ell'j}^m(\hat{\boldsymbol{x}}) = e^{i\delta}\Omega_{\ell'j}^m(\hat{\boldsymbol{x}}). \quad (4.364)$$

Pour déterminer la phase δ , nous choisissons la direction $\hat{\boldsymbol{x}} = \mathbf{e}_3$. Comme $Y_{\ell,m_\ell}(\mathbf{e}_3) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \delta_{m_\ell 0}$, on a

$$\Omega_{\ell'j}^m(\mathbf{e}_3) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \langle \ell, 0; 1/2, m | j, m \rangle \chi_m, \quad (4.365)$$

où $m = m_s = \pm \frac{1}{2}$. Pour $\hat{\boldsymbol{x}} = \mathbf{e}_3$, nous obtenons alors

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{x}})\Omega_{\ell'j}^m(\hat{\boldsymbol{x}}) = \sigma_3 \Omega_{\ell'j}^m(\mathbf{e}_3) = 2m \Omega_{\ell'j}^m(\mathbf{e}_3) = e^{i\delta} \Omega_{\ell'j}^m(\mathbf{e}_3). \quad (4.366)$$

Ceci n'est rien d'autre qu'une équation pour la phase δ :

$$2m\sqrt{2\ell+1} \langle \ell, 0; 1/2, m | j, m \rangle = e^{i\delta} \sqrt{2\ell'+1} \langle \ell', 0; 1/2, m | j, m \rangle, \quad (4.367)$$

où $\ell' = \ell \pm 1$ et $m = \pm 1/2$.

Le tableau ci-dessous donne les coefficients de Clebsch-Gordan relevants pour $\langle \ell, 0; 1/2, m | j, m \rangle$:

	$m = \frac{1}{2}$	$m = -\frac{1}{2}$
$j = \ell + \frac{1}{2}$	$\left(\frac{\ell+1/2+m}{2\ell+1}\right)^{1/2}$	$\left(\frac{\ell+1/2-m}{2\ell+1}\right)^{1/2}$
$j = \ell - \frac{1}{2}$	$-\left(\frac{\ell+1/2-m}{2\ell+1}\right)^{1/2}$	$\left(\frac{\ell+1/2+m}{2\ell+1}\right)^{1/2}$

TAB. 4.2 – Coefficients de Clebsch-Gordan pour $m = \frac{1}{2}$ et $m = -\frac{1}{2}$.

Pour tous les cas, $j = \ell \pm 1/2$ et $m = \pm 1/2$, on obtient alors $e^{i\delta} = -1$. Donc

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{x}})\Omega_{\ell'j}^m = -\Omega_{\ell'j}^m, \quad (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{x}})\Omega_{\ell'j}^m = -\Omega_{\ell'j}^m. \quad (4.368)$$

Comme $\gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & 0 \end{pmatrix}$ dans la représentation de Dirac-Pauli, nous obtenons

$$-i\gamma^5(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{x}}) \begin{pmatrix} \Omega_{\ell'j}^m(\hat{\boldsymbol{x}})G(r) \\ i\Omega_{\ell'j}^m(\hat{\boldsymbol{x}})F(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Omega_{\ell'j}^m(\hat{\boldsymbol{x}})F(r) \\ i\Omega_{\ell'j}^m(\hat{\boldsymbol{x}})G(r) \end{pmatrix}. \quad (4.369)$$

Avec cette identité, si on insère l'ansatz (4.359) dans Eq. (4.363), on obtient alors un système d'équations différentielles couplées du premier ordre :

$$\left(\partial_r - \frac{q}{r}\right) F = (m - \epsilon)G, \quad (4.370)$$

$$\left(\partial_r + \frac{q}{r}\right) G = (m + \epsilon)F, \quad (4.371)$$

avec $q = \eta(j + 1/2) = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, i.e., $|q| = j + 1/2$. D'après Eq. (4.359), il est clair que $\ell = q$ si $q > 0$ et $\ell = -(q+1)$ si $q < 0$. De plus, puisque $|q| = j + 1/2$, q détermine j , ℓ , ℓ' et η comme dans le tableau ci-dessous :

	j	ℓ	ℓ'	η
$q > 0$	$q - \frac{1}{2}$	q	$q - 1$	$+1$
$q < 0$	$-q - \frac{1}{2}$	$-q - 1$	$-q$	-1

TAB. 4.3 –

Le système d'équations différentielles (4.370)–(4.371) peut être reformulé sous la forme d'équations différentielles homogènes du deuxième ordre :

$$\partial_r^2 F + \left[p^2 - \frac{q(q-1)}{r^2} \right] F = 0 , \quad (4.372)$$

$$\partial_r^2 G + \left[p^2 - \frac{q(q+1)}{r^2} \right] G = 0 , \quad (4.373)$$

où $p^2 = \epsilon^2 - m^2$. D'après notre tableau, $q(q+1) = \ell(\ell+1)$, i.e., $q(q+1)r^{-2}$ est le terme centrifuge habituel pour G . De manière similaire, $q(q-1) = \ell'(\ell'+1)$ et $q(q-1)r^{-2}$ est le terme centrifuge pour F . La solution de Eq. (4.373), qui est régulière en $r = 0$, est la fonction de Bessel sphérique,

$$G(r) = Nr j_\ell(pr) , \quad (4.374)$$

où N est une constante de normalisation. Pour déterminer F , nous faisons simplement appel à la relation du premier ordre (4.371), i.e.,

$$F = \frac{1}{\epsilon + m} \left(\partial_r + \frac{q}{r} \right) G . \quad (4.375)$$

Avec les relations de récurrence (exercice)

$$j'_\ell(x) = \frac{\ell}{x} j_\ell(x) - j_{\ell+1}(x) , \quad (4.376)$$

$$j'_\ell(x) = j_{\ell-1}(x) - \frac{\ell+1}{x} j_\ell(x) \quad (4.377)$$

on a, pour les deux cas $q > 0$ et $q < 0$,

$$F = \frac{N}{\epsilon + m} \text{sgn}(q) pr j_{\ell'}(pr) , \quad (4.378)$$

tel que, finalement,

$$\Psi_{qm} = \Psi_{jm}^\eta = N \left(\begin{array}{c} j_\ell(pr) \Omega_{\ell j}^m \\ \frac{ip}{\epsilon+m} \text{sgn}(q) j_{\ell'}(pr) \Omega_{\ell' j}^m \end{array} \right) . \quad (4.379)$$

Les solutions (4.379) sont les ondes sphériques hors de la portée d'un potentiel, i.e., pour l'hamiltonien $H = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m$. Si un potentiel électrique à symétrie sphérique est ajouté à cet hamiltonien, l'unique modification qu'il faut apporter à notre formalisme est de remplacer ϵ par $\epsilon - V(r)$ dans Eqs. (4.370)–(4.371). Ceci mène à d'autres fonctions $\tilde{G}(r)$ et $\tilde{F}(r)$. La normalisation $\int d^3x \Psi^* \Psi = 1$ implique $\int dr (\tilde{F}^2 + \tilde{G}^2) = 1$. Pour un potentiel de Coulomb $V(r) = -\frac{Z\alpha}{r}$, le

système d'équations différentielles est alors

$$\left(\partial_r - \frac{q}{r}\right) \tilde{F} = \left(m - \epsilon - \frac{Z\alpha}{r}\right) \tilde{G}, \quad (4.380)$$

$$\left(\partial_r + \frac{q}{r}\right) \tilde{G} = \left(m + \epsilon + \frac{Z\alpha}{r}\right) \tilde{F}. \quad (4.381)$$

Ce système peut être résolu exactement en terme des fonctions hypergéométriques (e.g., cf. [22]).

Coefficients de Clebsch-Gordan

Nous savons que

$$\mathcal{D}^\ell \otimes \mathcal{D}^{\ell'} = \sum_{j=|\ell-\ell'|}^{\ell+\ell'} \mathcal{D}^j. \quad (4.382)$$

Une base naturelle de l'espace \mathcal{E}^ℓ qui porte la représentation \mathcal{D}^ℓ de $SU(2)$ est formée par les états propres de $\mathcal{D}_*^\ell(\sigma_3)\Psi_m = m\Psi_m$. Il est pratique de dénommer cette base par $|\ell, m\rangle$. On procède de manière similaire pour établir la base $|\ell', m'\rangle$. Une base de l'espace $\mathcal{E}^\ell \otimes \mathcal{E}^{\ell'}$ peut être construite grâce aux produits tensoriels des bases de \mathcal{E}^ℓ et $\mathcal{E}^{\ell'}$, i.e., les états $|\ell, m\rangle \otimes |\ell', m'\rangle =: |\ell, m; \ell', m'\rangle$. Or, la décomposition (4.382) force l'existence d'une base de la forme $|j, m_j\rangle$ de $\mathcal{E}^\ell \otimes \mathcal{E}^{\ell'}$ avec $|\ell - \ell'| \leq j \leq \ell + \ell'$ et $-j \leq m_j \leq j$. Il est évident que les états $|\ell, m\rangle$ sont orthogonaux pour des valeurs de ℓ et m différentes. Nous pouvons alors les normaliser tel que les bases $|\ell, m; \ell', m'\rangle$ et $|j, m_j\rangle$ forment les deux des bases orthonormées de $\mathcal{E}^\ell \otimes \mathcal{E}^{\ell'}$. Il existe donc une transformation unitaire qui permet le passage d'une base à l'autre. Celle-ci peut être décrite par l'équation

$$|j, m_j\rangle = \sum_{m, m'} \langle \ell, m; \ell', m' | j, m_j \rangle |\ell, m; \ell', m'\rangle. \quad (4.383)$$

Les éléments de matrice $\langle \ell, m; \ell', m' | j, m_j \rangle$ sont les coefficients de Clebsch-Gordan. On peut les trouver dans des tableaux ou avec *Mathematica*. Attention, la notation n'est pas unique!

La décomposition (4.382) nous indique, par exemple, que

$$\langle \ell, m; \ell', m' | j, m_j \rangle = 0 \quad \text{si} \quad j \notin \{|\ell - \ell'|, |\ell - \ell'| + 1, \dots, \ell + \ell'\}. \quad (4.384)$$

De plus, nous avons

$$\langle \ell, m; \ell', m' | j, m_j \rangle = 0 \quad \text{si} \quad m_j \neq m + m', \quad (4.385)$$

$$|\langle \ell, \ell; \ell', \ell' | \ell + \ell', \ell + \ell' \rangle| = 1 \quad \text{et} \quad (4.386)$$

$$|\langle \ell, -\ell; \ell', -\ell' | \ell + \ell', -(\ell + \ell') \rangle| = 1. \quad (4.387)$$

La phase n'est pas unique, mais elle est normalement choisie telle que l'on ait $\langle \ell, \ell; \ell', \ell' | \ell + \ell', \ell + \ell' \rangle \equiv 1$.

Pour $\ell = \ell' = \frac{1}{2}$ par exemple, les coefficients de Clebsch-Gordan non-nuls

sont (exercice) :

$$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 1, 1 \rangle = 1, \quad (4.388)$$

$$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 1, -1 \rangle = 1, \quad (4.389)$$

$$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 1, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} = \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 1, 0 \rangle, \quad (4.390)$$

$$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 0, 0 \rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}} = -\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 0, 0 \rangle. \quad (4.391)$$

Nous rappelons que ces résultats ont déjà été obtenus dans l'étude de l'atome d'hélium (cf. Chapitre 2).

4.10 Le problème des solutions à énergie négative et la conjugaison de charge

Dans l'introduction de ce chapitre, nous avons mentionné que l'équation de Dirac libre admet des solutions d'énergie positive, mais également des solutions d'énergie négative. Pour $p = (p^\mu) = (p^0, \mathbf{p})$ avec $p^0 = \epsilon > 0$, nous avons donc deux solutions de l'équation de Dirac,

$$\Psi_{\pm p}(x) = u_{\pm p}(\mathbf{p}) e^{\mp i p x}, \quad (4.392)$$

où la fonction d'onde $\Psi_{-p}(x)$ est associée à une énergie $-p^0 < 0$. En l'absence d'interaction, le spectre de H ne possède pas de borne inférieure, il est donné par les intervalles semi-infinis, $(-\infty, -mc^2] \cup [mc^2, \infty)$. L'espace de Hilbert des états consiste des spineurs de Dirac dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^4$ muni du produit scalaire

$$(\Phi, \Psi) = \int_{x^0 = \text{cst}} d^3x \Phi^*(x) \Psi(x). \quad (4.393)$$

Sur cet espace de Hilbert, nous considérons la *conjugaison de charge* :

$$\mathcal{U}_C : \Psi \mapsto \Psi_C := C \Psi^{\dagger T}. \quad (4.394)$$

Ici nous demandons que C soit une matrice unitaire avec les propriétés

$$C^{-1} \gamma^\mu C = -\gamma^{\mu T}, \quad (4.395)$$

$$C^T = -C, \quad (4.396)$$

$$C^* C = \mathbb{1}_4. \quad (4.397)$$

Une telle matrice existe. Par exemple, si $\epsilon = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ dénote la matrice spinorielle définie par Eq. (4.76), on a (exercice)

$$(C)_w = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & -\epsilon \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad (C)_{DP} = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon \\ \epsilon & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.398)$$

Ces matrices satisfont à toutes les conditions (4.395)–(4.397).

La transformation \mathcal{U}_C possède les propriétés suivantes :

- \mathcal{U}_C est anti-unitaire : $(\Phi_C, \Psi_C) = \overline{(\Phi, \Psi)}$.

$$\begin{aligned}
(\Phi_C, \Psi_C) &= \int d^3x \left(C [\Phi^* \gamma^0]^T \right)^* \left(C [\Psi^* \gamma^0]^T \right) \\
&= \int d^3x (\Phi^T \gamma^0 C^*) \left(C \gamma^0 \Psi^{T*} \right) \\
&= \int d^3x (\Psi^* \Phi)^T \\
&= (\Psi, \Phi) = \overline{(\Phi, \Psi)}.
\end{aligned} \tag{4.399}$$

- \mathcal{U}_C est involutive : $\mathcal{U}_C(\mathcal{U}_C \Psi) = \Psi$.

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}_C(\mathcal{U}_C \Psi) &= C \left(C \Psi^{\dagger T} \right)^{\dagger T} = C \left(\left(C \Psi^{\dagger T} \right)^* \gamma^0 \right)^T = C \left(\Psi^{\dagger T*} C^{-1} \gamma^0 \right)^T \\
&= C (\gamma^0)^T (C^{-1})^T \Psi^{\dagger*} = -C (\gamma^0)^T C^{-1} \Psi^{\dagger*} = \gamma^0 \Psi^{\dagger*} \\
&= \gamma^0 (\Psi^* \gamma^0)^* = \Psi,
\end{aligned} \tag{4.400}$$

Pour terminer, il nous reste à démontrer que \mathcal{U}_C est bien l'opérateur de conjugaison de charge. Pour ceci, nous comparons les valeurs d'attente des hamiltoniens

$$H(\pm e) := \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} \mp e\mathbf{A}) + \beta m \pm e\phi, \tag{4.401}$$

dans les états Ψ et $\Psi_C = \mathcal{U}_C \Psi$. Avec $\alpha^k = \gamma^0 \gamma^k$ et $\beta = \gamma^0$, nous obtenons

$$\begin{aligned}
C^{-1} \alpha^k C &= C^{-1} \gamma^0 \gamma^k C = C^{-1} \gamma^0 C C^{-1} \gamma^k C = (-\gamma^0)^T (-\gamma^k)^T \\
&= (\gamma^k \gamma^0)^T = -(\gamma^0 \gamma^k)^T = -(\alpha^k)^T,
\end{aligned} \tag{4.402}$$

$$C^{-1} \beta C = C^{-1} \gamma^0 C = (-\gamma^0)^T = -\beta^T, \tag{4.403}$$

$$\begin{aligned}
\hookrightarrow C^{-1} H(\pm e) C &= C^{-1} [\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} \mp e\mathbf{A}) + \beta m \pm e\phi] C \\
&= -\boldsymbol{\alpha}^T (\mathbf{p} \mp e\mathbf{A}) - \beta^T m \pm e\phi.
\end{aligned} \tag{4.404}$$

Nous avons donc

$$\begin{aligned}
(\Psi_C, H(\pm e) \Psi_C) &= \left(C \Psi^{\dagger T}, H(\pm e) C \Psi^{\dagger T} \right) \\
&= \left(\Psi^{\dagger T}, C^{-1} H(\pm e) C \Psi^{\dagger T} \right) \\
&= \int d^3x \left(\Psi^{\dagger T} \right)^* [-\boldsymbol{\alpha}^T (\mathbf{p} \mp e\mathbf{A}) - \beta^T m \pm e\phi] \Psi^{\dagger T} \\
&\stackrel{i)}{=} \int d^3x \Psi^{\dagger} [-\boldsymbol{\alpha} (-\mathbf{p} \mp e\mathbf{A}) - \beta m \pm e\phi] \Psi^{\dagger*} \\
&= \int d^3x \Psi^* \gamma^0 [-\boldsymbol{\alpha} (-\mathbf{p} \mp e\mathbf{A}) - \beta m \pm e\phi] (\gamma^0)^* \Psi \\
&\stackrel{ii)}{=} - \int d^3x \Psi^* [\boldsymbol{\alpha} (\mathbf{p} \pm e\mathbf{A}) + \beta m \mp e\phi] \Psi \\
&= -(\Psi, H(\mp e) \Psi),
\end{aligned} \tag{4.405}$$

où nous avons utilisé

- i)* D'une part, l'intégrant est un scalaire; il est donc égal à son transposé. D'autre part, le changement de signe de $\mathbf{p} \mapsto -\mathbf{p}$ est dû à l'intégration par partie, car l'opérateur $p^j = i\partial_j$ agit désormais sur Ψ^\dagger^* .
- ii)* $\gamma^0 \alpha^k (\gamma^0)^* = \gamma^0 (\gamma^0 \gamma^k) (\gamma^0)^* = -\gamma^0 \gamma^k \gamma^0 (\gamma^0)^* = -\alpha^k$ et $\gamma^0 \beta (\gamma^0)^* = \beta$.

En guise de conclusion, nous formulons un certain nombre de remarques :

- ★ L'hamiltonien $H(+e)$ n'a pas de borne inférieure, i.e., il n'existe pas d'énergie minimale, comme il n'a de borne supérieure pour $H(-e)$.
- ★ A tout état propre Ψ de $H(+e)$ correspond l'état Ψ_C qui est état propre de $H(-e)$ avec impulsion \mathbf{p} et énergie ϵ . Un petit calcul montre que dans le cas libre $e \rightarrow 0$, $(\Psi_{+p}^{(\lambda)})_C = \Psi_{-p}^{(-\lambda)}$. Si Ψ décrit un électron avec énergie ϵ , nous dirons que Ψ_C est l'état d'un *positron* avec la même énergie $+\epsilon$, impulsion $+\mathbf{p}$ et masse m . Donc les états d'énergie négative peuvent être compris comme des particules à charge opposée avec énergie positive.
- ★ Le problème des énergies négatives est résolu de façon entièrement consistante dans la théorie quantique des champs.
- ★ Dans sa théorie des trous, Dirac a identifié le vide physique avec un système où tous les états d'énergie négative sont occupés.
Si, dans une interaction, un des électrons d'énergie négative (appartenant au vide) obtient suffisamment d'énergie ($> 2m_e c^2$) pour avoir une énergie finale positive, un électron physique et un trou dans le vide (de même masse, mais de charge $-e$) se forment simultanément : c'est la création d'une paire électron/positron. Un des problèmes qui se pose avec cette idée et que ce vide physique porte une charge infinie qui n'est pas mesurée. Ce problème est adressé dans la théorie quantique du champs de Dirac avec la "renormalisation" de la charge.

La théorie des trous de Dirac est la première théorie qui ne décrit pas une seule particule, mais qui se réfère à l'ensemble des électrons et positrons. Ceci est seulement possible dans le cadre de la théorie quantique relativiste pour échapper au problème des énergies négatives.

Annexe

A.1 Notation spectroscopique

Nous considérons la notation spectroscopique de [6].

- **Système de deux nucléons de spin 1/2 :**

Dans ce cas, il faut coupler trois moments cinétiques, le moment orbital et les deux spins, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. On couple d'abord les deux spins, ce qui donne le spin total \mathbf{S} , donc les deux valeurs possibles sont 0 et 1. Puis on couple ce dernier avec le moment cinétique \mathbf{L} de la coordonnée relative, qui peut prendre des valeurs entières positives ou nulles. A chaque couple de valeurs (L, S) correspondent $(2S+1)(2L+1)$ vecteurs pouvant se combiner linéairement pour donner des vecteurs propres du moment cinétique total. Suivant le théorème d'addition, on trouve les valeurs suivantes de J :

$$\begin{aligned} \text{état singulet : } S = 0 & \quad J = L , \\ \text{état triplet : } S = 1 & \quad \begin{cases} J = L - 1, L, L + 1 & \text{si } L \neq 0 , \\ J = 1 & \text{si } L = 0 . \end{cases} \end{aligned}$$

Pour désigner les termes ainsi formés, on emploie la notation spectroscopique suivante :

$${}^n X(L)_J \equiv \begin{cases} n = 2S + 1 & : \text{ multiplicité du spin total ,} \\ X(L) & : \text{ moment cinétique orbital ,} \\ J & : \text{ moment cinétique total .} \end{cases}$$

Pour représenter le moment cinétique orbital, $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$, on utilise la notation $X(L) = S, P, D, F, G, H, \dots$, respectivement. Dans le cas de deux nucléons de spin 1/2, à chaque valeur de J correspondent quatre termes (c'est-à-dire $4(2J+1)$ vecteurs en tout) sauf pour $J = 0$ qui n'en possède que deux. Ci-dessous, les différents termes correspondant aux premières valeurs de J :

$$\begin{array}{llll} J = 0 : & & {}^3P_0 & {}^1S_0 \\ J = 1 : & {}^3S_1 & {}^3P_1 & {}^3D_1 \quad {}^1P_1 \\ J = 2 : & {}^3P_2 & {}^3D_2 & {}^3F_2 \quad {}^1D_2 \\ J = 3 : & {}^3D_3 & {}^3F_3 & {}^3G_3 \quad {}^1F_3 \end{array}$$

Par exemple, 3D_2 est le terme $L = 2$, triplet de spin, de moment total $J = 2$.

- **Particule de spin 1/2 :**

Une notation similaire s'applique au cas d'une particule de spin 1/2. Dans ce cas, le moment orbital est désigné par une lettre minuscule — les lettres majuscules étant réservées au moment orbital total d'un système de plusieurs particules — et l'indice supérieur gauche est simplement omis. Par exemple, les termes correspondant aux premières valeurs de j sont

$$\begin{aligned} j = 1/2 & : & s_{\frac{1}{2}} & p_{\frac{1}{2}} \\ j = 3/2 & : & p_{\frac{3}{2}} & d_{\frac{3}{2}} \\ j = 5/2 & : & d_{\frac{5}{2}} & f_{\frac{5}{2}} \\ j = 7/2 & : & f_{\frac{7}{2}} & g_{\frac{7}{2}} \\ & \dots & & \end{aligned}$$

A.2 Matrices de Pauli

Les matrices de Pauli sont des matrices hermitiennes définies telles que

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

Par commodité, on écrit souvent

$$\sigma_0 = \mathbb{I}_2, \quad \boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = (\sigma_k). \quad (\text{A.2})$$

Toute matrice 2×2 hermitienne et de trace nulle peut être exprimée comme combinaison linéaire (réelle) des matrices σ_k . Ceci implique que *toute* matrice M hermitienne 2×2 peut être exprimée comme $M = a_0 \sigma_0 + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, où $a_0 = \frac{1}{2} \text{tr}(M)$ et $\mathbf{a} = \frac{1}{2} \text{tr}(M \boldsymbol{\sigma})$, $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$.

Les matrices de Pauli satisfont les relations suivantes :

$$\det(\sigma_k) = -1, \quad (\text{A.3})$$

$$\text{tr}(\sigma_k) = 0, \quad (\text{A.4})$$

$$(\sigma_0)^2 = (\sigma_1)^2 = (\sigma_2)^2 = (\sigma_3)^2 = \mathbb{I}_2, \quad (\text{A.5})$$

$$\sigma_1 \sigma_2 = -\sigma_2 \sigma_1 = i \sigma_3 \quad (\text{Cyc } 123), \quad (\text{A.6})$$

$$\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 = i \mathbb{I}_2. \quad (\text{A.7})$$

Les propriétés (A.5) et (A.6) peuvent être condensées sous la forme

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} \mathbb{I}_2 + i \sum_{\ell} \epsilon_{jkl} \sigma_{\ell}, \quad (\text{A.8})$$

$$[\sigma_j, \sigma_k] = \sigma_j \sigma_k - \sigma_k \sigma_j = 2i \sum_{\ell} \epsilon_{jkl} \sigma_{\ell}, \quad (\text{A.9})$$

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} = \sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j = 2\delta_{jk} \mathbb{I}_2, \quad (\text{A.10})$$

où ϵ_{ijk} désigne le tenseur antisymétrique à trois indices :

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 0 & \text{si deux indices sont égaux,} \\ +1 & \text{pour les permutations paires de } i, j, k, \\ -1 & \text{pour les permutations impaires de } i, j, k. \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

Soient deux opérateurs vectoriels, $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3)$ et $\mathbf{y} = (y^1, y^2, y^3)$. On suppose qu'ils commutent avec les matrices de Pauli, mais $[\mathbf{x}, \mathbf{y}] = 0$ n'est pas nécessaire (e.g., $\mathbf{x} = \mathbf{r}$ et $\mathbf{y} = \mathbf{p}$). Alors, les matrices de Pauli obéissent à la règle de multiplication

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{y}) &= \sum_{j,k} \sigma_j x^j \sigma_k y^k = \sum_{j,k} x^j y^k \left[\delta_{jk} \mathbb{I}_2 + i \sum_{\ell} \epsilon_{j k \ell} \sigma_{\ell} \right] \\ &= \sum_j x^j y^j \mathbb{I}_2 + \sum_{\ell} i \sigma_{\ell} \left[\sum_{j,k} \epsilon_{j k \ell} x^j y^k \right] \\ &= \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} \mathbb{I}_2 + i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{x} \wedge \mathbf{y}) . \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

De Eq. (A.6), il suit que pour \mathbf{x} arbitraire, nous avons

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x}) \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{x} \mathbb{I}_2 - i \mathbf{x} \wedge \boldsymbol{\sigma} , \quad (\text{A.13})$$

$$\boldsymbol{\sigma} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x}) = \mathbf{x} \mathbb{I}_2 + i \mathbf{x} \wedge \boldsymbol{\sigma} . \quad (\text{A.14})$$

Soit $g \equiv (g_{\mu\nu}) \equiv \text{diag}(+1, -1, -1, -1)$ le tenseur métrique fondamental du groupe de Lorentz. D'après la définition (4.105), i.e., $\hat{A} = \epsilon \bar{A} \epsilon^{-1}$ pour toute matrice $A \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$, nous avons

$$\sigma_{\mu} := (\sigma_0, \boldsymbol{\sigma}) , \quad (\text{A.15})$$

$$\sigma^{\mu} := g^{\mu\nu} \sigma_{\nu} = (\sigma_0, -\boldsymbol{\sigma}) , \quad (\text{A.16})$$

$$\hat{\sigma}_{\mu} := \epsilon \bar{\sigma}_{\mu} \epsilon^{-1} = \sigma^{\mu} , \quad (\text{A.17})$$

$$\hat{\sigma}^{\mu} := \epsilon \bar{\sigma}^{\mu} \epsilon^{-1} = \sigma_{\mu} . \quad (\text{A.18})$$

Avec ces définitions et la relation d'anti-commutation (A.10), il suit que nous avons les identités

$$\sigma_{\mu} \sigma^{\nu} + \sigma_{\nu} \sigma^{\mu} = \sigma_{\mu} \hat{\sigma}_{\nu} + \sigma_{\nu} \hat{\sigma}_{\mu} = 2g_{\mu\nu} \mathbb{I}_2 , \quad (\text{A.19})$$

$$\text{tr}(\sigma_{\mu} \hat{\sigma}_{\nu}) = \text{tr}(\hat{\sigma}_{\mu} \sigma_{\nu}) = \frac{1}{2} \text{tr}(\sigma_{\mu} \hat{\sigma}_{\nu} + \sigma_{\nu} \hat{\sigma}_{\mu}) = g_{\mu\nu} \text{tr}(\mathbb{I}_2) , \quad (\text{A.20})$$

où nous avons utilisé

$$\begin{aligned} \text{tr}(\sigma_{\mu} \hat{\sigma}_{\nu}) &= \text{tr}(\hat{\sigma}_{\mu} \sigma_{\nu}) \quad \text{si } (\mu, \nu) = (i, j) \quad \text{ou } (\mu, \nu) = (0, 0) , \\ \text{tr}(\hat{\sigma}_i \sigma_0) &= \text{tr}(\hat{\sigma}_i) = 0 \quad \text{si } (\mu, \nu) = (i, 0) . \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

A.3 Deux solutions de l'équation de Schrödinger

A.3.1 Les états principaux de l'atome d'hydrogène

L'atome d'hydrogène a été discuté en détail dans le cours mécanique quantique I. A cause de son importance pour notre cours, surtout dans le chapitre 2 où nous discutons les perturbations de l'atome d'hydrogène, nous rappelons ci-dessous les expressions pour les fonctions d'onde des états propres de l'atome

d'hydrogène et leur énergie :

$$\Phi_{n\ell m}(\mathbf{x}) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}) , \quad n \geq 1, \ell < n, -\ell \leq m \leq \ell \quad (\text{A.22})$$

$$R_{n\ell}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}} \rho^\ell e^{-\rho/2} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho) , \quad (\text{A.23})$$

$$\rho = \left(\frac{2Zr}{na_0}\right) . \quad (\text{A.24})$$

Dans ces expressions, les fonctions $Y_{\ell m}$ sont les harmoniques sphériques discutées dans le chapitre 1, L_k dénote le polynôme de Laguerre du degrés k et L_{k-j}^j est un polynôme de Laguerre associé du degrés $k-j$.

$$L_{k-j}^j(x) = (-1)^j \frac{d^j L_k}{dx^j} , \quad k \geq j , \quad (\text{A.25})$$

$$\text{avec} \quad L_k(x) = e^x \frac{d^k}{dx^k} (x^k e^{-x}) . \quad (\text{A.26})$$

Attention ! La notation pour les polynôme de Laguerre associés n'est pas unique ; nous utilisons celle de [13]. Le rayon de Bohr, a_0 , est donné par

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \simeq 0.529 \times 10^{-8} \text{cm} , \quad \text{où} \quad m_e = 0.511 \text{MeV}/c^2 \quad (\text{A.27})$$

est la masse de l'électron, e est sa charge et $-Ze$ est la charge du noyau. Par exemple, l'état fondamental est

$$\Phi_{100}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-|\mathbf{x}|/a} , \quad a = a_0/Z . \quad (\text{A.28})$$

L'énergie E_n de l'état $\Phi_{n\ell m}$ ne dépend que du nombre quantique principal, n . Elle est alors $n^2 = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1)$ fois dégénérée. Cette dégénérescence est levée par les structures fine et hyperfine discutées dans le chapitre 2.

$$E_n = -\frac{m_e c^2 (Z\alpha)^2}{2n^2} , \quad (\text{A.29})$$

où $\alpha = e^2/(\hbar c) \simeq 1/137$ est la constante de structure fine. Il suit que (pour $Z=1$, l'atome d'hydrogène) $E_1 = -13.6 \text{eV} = -1 \text{Ry}$ (Rydberg).

Les fonctions d'onde $\Phi_{n\ell m}$ satisfont à l'équation de Schrödinger stationnaire pour un électron autour d'un noyau ponctuel de charge $-Ze$,

$$E_n \Phi_{n\ell m} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{r} \right) \Phi_{n\ell m} . \quad (\text{A.30})$$

A.3.2 L'oscillateur harmonique

Nous considérons le problème le plus simple et peut-être aussi le plus important de la mécanique quantique : l'oscillateur harmonique en une dimension. Ce problème a été discuté dans les détails dans le cours de mécanique quantique I et nous ne présentons ici que les solutions.

L'hamiltonien est donné par

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 . \quad (\text{A.31})$$

Les états stationnaires sont

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n!}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right), \quad (\text{A.32})$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (\text{A.33})$$

Ici H_n est le polynôme de Hermite de degrés n , défini par

$$H_n(z) = e^{z^2} \left(-\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2}. \quad (\text{A.34})$$

Les propriétés de ces importants polynômes se trouvent dans la littérature de la mécanique quantique (voir bibliographie). Avec le pré-facteur donné les fonctions d'ondes sont normalisées,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_n(x) u_m(x) = \delta_{mn}. \quad (\text{A.35})$$

A.4 Matrices de Dirac

A.4.1 Propriétés générales

Irrespectivement de la représentation, les matrices de Dirac satisfont à un certain nombre de propriétés que nous énumérons ci-dessous.

Matrices γ^μ

Les matrices γ^μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$) de Dirac sont définies par les conditions suivantes :

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \mathbb{I}_4 \quad : \text{ anti-commutativité} \quad (\text{A.36})$$

$$(\gamma^0)^* = \gamma^0, \quad (\gamma^0)^2 = \mathbb{I}_4 \quad : \text{ hermité} \quad (\text{A.37})$$

$$(\gamma^k)^* = -\gamma^k, \quad (\gamma^k)^2 = -\mathbb{I}_4 \quad : \text{ anti-hermité} \quad (\text{A.38})$$

$$\gamma^0 (\gamma^\mu)^* \gamma^0 = \gamma^\mu, \quad \mu = 0, k \quad : \text{ réalité} \quad (\text{A.39})$$

$$S(A)^{-1} \gamma^\mu S(A) = \Lambda(A)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \quad : \text{ Lorentz} \quad (\text{A.40})$$

La condition de réalité (A.39) peut être déduite d'après Eqs. (A.37) et (A.38). Finalement, $S(A)$ dénote les transformations de Lorentz pour un 4-spineur : $\Psi'(x') = S(A)\Psi(x)$ pour $x \rightarrow x' = \Lambda(A)x$ et $A \in SL(2, \mathbb{C})$.

La matrice γ^5 est définie telle que

$$\gamma_5 \equiv \gamma^5 := i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3, \quad (\text{A.41})$$

et satisfait les relations

$$\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0, \quad (\gamma^5)^2 = \mathbb{I}_4, \quad (\gamma^5)^* = -\gamma^0\gamma^5\gamma^0. \quad (\text{A.42})$$

D'après la définition (A.41) et les propriétés (A.42), nous avons

$$\left[\frac{1}{2}(\mathbb{I}_4 \pm \gamma^5)\right]^2 = \frac{1}{2}(\mathbb{I}_4 \pm \gamma^5). \quad (\text{A.43})$$

On voit alors facilement qu'un spineur $\Psi(x)$ peut être séparé en une partie "gauche" $\Psi_L(x)$, et une partie "droite" $\Psi_R(x)$:

$$\Psi_L = \frac{1}{2} (\mathbb{1}_4 - \gamma^5) \Psi, \quad \Psi_R = \frac{1}{2} (\mathbb{1}_4 + \gamma^5) \Psi. \quad (\text{A.44})$$

Matrices $\sigma^{\mu\nu}$

Les matrices $\sigma^{\mu\nu}$ sont définies telles que

$$\sigma^{\mu\nu} := \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] = i\gamma^\mu\gamma^\nu \quad (\mu \neq \nu). \quad (\text{A.45})$$

Matrices α et β

Les matrices α et β sont définies telles que

$$\alpha^k := \gamma^0\gamma^k, \quad \beta := \gamma^0. \quad (\text{A.46})$$

Elles satisfont aux relations

$$\{\alpha^j, \alpha^k\} = \alpha^j\alpha^k + \alpha^k\alpha^j = 2\delta_{jk}, \quad (\text{A.47})$$

$$\{\alpha^j, \beta\} = \alpha^j\beta + \beta\alpha^j = 0, \quad (\text{A.48})$$

$$(\alpha^j)^2 = \mathbb{1}_4 = \beta^2, \quad (\text{A.49})$$

$$\{\gamma_5, \beta\} = 0, \quad [\gamma_5, \alpha^j] = 0. \quad (\text{A.50})$$

Dans une représentation qui obéit aux équations de réalité $\gamma^0(\gamma^\mu)^*\gamma^0 = \gamma^\mu$, les matrices α et β sont hermitiennes,

$$(\beta)^* = (\gamma^0)^* = \gamma^0 = \beta, \quad (\text{A.51})$$

$$(\alpha^j)^* = (\gamma^j)^*(\gamma^0)^* = -\gamma^j\gamma^0 = \gamma^j\gamma^0 = \alpha^j. \quad (\text{A.52})$$

A.4.2 Représentation (chirale) de Weyl

Dans cette représentation, les matrices de Dirac sont données par

$$(\gamma^\mu)_w = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\mu \\ \hat{\sigma}^\mu & 0 \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \hat{\sigma}^\mu = \epsilon\bar{\sigma}^\mu\epsilon^{-1} = \sigma_\mu. \quad (\text{A.53})$$

Explicitement, nous avons donc

$$(\gamma^0)_w = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (\alpha)_w = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & -\sigma \end{pmatrix} \quad (\text{A.54})$$

$$(\gamma^k)_w = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \quad (\gamma^5)_w = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.55})$$

$$(\sigma^{0k})_w = i \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & -\sigma_k \end{pmatrix} \quad (\sigma^{ij})_w = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix} \quad (\text{A.56})$$

avec permutations cycliques de (i, j, k) pour σ^{ij} .

Un des avantages de la représentation de Weyl est que les transformations de Lorentz $S(A)$ sont données par deux blocs invariants,

$$S_w(A) := \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & \hat{A} \end{pmatrix}, \quad \hat{A} := \epsilon\bar{A}\epsilon^{-1}. \quad (\text{A.57})$$

Nous avons alors

$$\left[S_W(A), (\gamma^5)_W \right] = 0. \quad (\text{A.58})$$

A.4.3 Représentation de Dirac-Pauli

Le passage de la représentation de Weyl à la représentation de Dirac-Pauli est obtenu grâce à la matrice de transformation

$$T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{4 \times 4}, \quad (T^{-1} = T), \quad (\text{A.59})$$

qui permet de définir de nouvelles matrices de Dirac,

$$(\gamma^\mu)_{DP} := T (\gamma^\mu)_W T^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}^\mu + \sigma^\mu & \hat{\sigma}^\mu - \sigma^\mu \\ -(\hat{\sigma}^\mu - \sigma^\mu) & -(\hat{\sigma}^\mu + \sigma^\mu) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.60})$$

Explicitement, les matrices de Dirac sont alors

$$(\gamma^0)_{DP} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \quad (\boldsymbol{\alpha})_{DP} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.61})$$

$$(\gamma^k)_{DP} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix} \quad (\gamma^5)_{DP} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.62})$$

$$(\sigma^{0k})_{DP} = i \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \quad (\sigma^{ij})_{DP} = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix} \quad (\text{A.63})$$

avec permutations cycliques de (i, j, k) pour σ^{ij} .

Bibliographie

- [1] N. Straumann, *Quantenmechanik*, Springer, 2002.
- [2] B. L. van der Waerden, *Group theory and quantum mechanics*, Springer-Verlag, 1980.
- [3] H. Weyl, *The theory of groups and quantum mechanics*, Dover Publications, 1950.
- [4] R. D. Richtmyer, *Principles of advanced mathematical physics, Vol. II*, Springer, 1981.
- [5] W. Fulton and J. Harris, *Representation theory : A first course*, Springer-Verlag, 1991.
- [6] A. Messiah, *Mécanique quantique, Vol. I & II*, Dunod, 1964.
- [7] R. Durrer, *La théorie des groupes et la mécanique quantique*, Université de Genève, 2004.
- [8] M. Reed and B. Simon, *Functional Analysis*, Academic Press, 1980.
- [9] M. Maggiore, *An Introduction to Quantum Field Theory* Oxford University Press, 2004.
- [10] W. Amrein, J. Jauch and K. Sinha, *Scattering Theory in Quantum Mechanics*, Benjamin, 1977.
- [11] T. Kato, *Perturbation theory of linear operators*, Springer, 1995.
- [12] C. Cohen-Tanoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Mécanique quantique, Vol. I et II*, Hermann, 1992.
- [13] A. Capri *Nonrelativistic Quantum Mechanics*, World Scientific, 2002.
- [14] Compléments de mathématiques II, Université de Genève, 2003.
- [15] T. Ikebe, Arch. Ration. Mech. Anal. **5**, 1 (1960).
- [16] L. Faddeev, *Mathematical aspects of the three-body problem in quantum scattering theory*, Isreal Program for Scientific Translations, 1965.
- [17] O. Laporte and G. E. Uhlenbeck, Phys. Rev. **37**, 1380 (1931).
- [18] R. Penrose and W. Rindler, *Spinors and space-time, Vol. I*, Cambridge University Press, 1984.
- [19] M. Fierz, Helv. Phys. Acta **12**, 3 (1939).
- [20] M. Fierz and W. Pauli, *On relativistic wave equations for particles of arbitrary spin in an electromagnetic field*. Proc. R. soc. London Ser. A **173**, 211 (1939).
- [21] W. Rarita and J. Schwinger, *On a theory of particles with half-integer spin*. Phys. Rev. **60**, 61 (1941).

- [22] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Relativistic Quantum Field Theory*, Vol. IV, Pergamon press, 1958.