
Klein-Gordon et Dirac

en physique quantique relativiste

Daniel FARQUET

Section de Physique
EPFL

Travail présenté à

Claudio SCRUCCA

Résumé

Ce document présente de manière concise l'étude des équations de Klein-Gordon et de Dirac avec le point de vue de la mécanique quantique relativiste. On commence chaque fois par une étude générale de l'équation, des courants conservés ainsi que de la généralisation au cas où un champ électromagnétique est présent. On se concentre ensuite sur la limite non relativiste ainsi que son application au problème à potentiel Coulombien. On s'attarde particulièrement sur l'atome d'hydrogène avec l'équation de Dirac. L'accent est également mis sur le Zitterbewegung qui est étudié en détail et de deux manières différentes. Finalement, on motive la prédiction d'antiparticules par un exemple de potentiel step.

Motivations et prérequis : Ce document est une première approche dans l'étude de l'équation de Klein-Gordon et de Dirac. On y traite les implications les plus directes de ces deux équations et on interprète physiquement ce qu'on trouve. La structure a été pensée de telle sorte qu'on utilise des résultats déjà démontrés, connus, ou dont la démonstration a été acceptée précédemment, ce qui évite de devoir jongler entre plusieurs parties. Par contre, les équations de Klein-Gordon et de Dirac sont posées sans aucune argumentation physique, et le lecteur est renvoyé à [1] ou [6] pour comprendre les arguments qui ont poussé à poser ces équations. Notons enfin que les étapes de calculs ne sont pas toujours explicitées, mais que les grandes lignes du raisonnement sont toujours mentionnées.

En ce qui concerne les prérequis, on suppose que la mécanique quantique non relativiste de base est connue. Des résultats concernant l'atome d'hydrogène seront utilisés sans démonstration. On utilise également des résultats sur le groupe de Lorentz et la théorie des groupes. La formulation covariante de la physique doit aussi être connue. Par simplicité et pour éviter la lourdeur des équations, le système d'unité est le système naturel, i.e. $\hbar = c = 1$.

Notation : On utilise les matrices σ^i de Pauli dont les définitions sont

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Le quadri-gradient est défini par

$$\partial_\mu = (\partial_t, \vec{\nabla})$$

et le quadri-opérateur d'impulsion est

$$p_\mu = i\partial_\mu.$$

Ainsi l'opérateur d'impulsion s'écrit

$$\vec{p} = -i\vec{\nabla}.$$

On note le quadrivecteur d'onde k^μ par

$$k^\mu = (E, \vec{k})$$

où E est l'énergie et \vec{k} le vecteur d'onde. Lorsque l'on écrit \vec{a} , on fait référence à un vecteur

$$\vec{a} = (a^1, a^2, a^3).$$

Quand on utilise la métrique de Minkowski, on prend la convention

$$\eta^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1).$$

Table des matières

1	Théorie de Klein-Gordon	3
1.1	Equation de Klein-Gordon et courant conservé	3
1.2	Solutions libres	4
1.3	Interaction électromagnétique	5
1.4	Limite non relativiste	5
1.5	Atomes mésoniques	8
1.6	Zitterbewegung	10
1.7	Antiparticules	13
2	Théorie de Dirac	15
2.1	Equation de Dirac et courant conservé	15
2.2	Interaction électromagnétique et covariance	17
2.3	Chiralité	19
2.4	Solutions libres	21
2.5	Limite non relativiste	24
2.6	Atome d'hydrogène	27
2.7	Lamb shift	28
2.8	Zitterbewegung	31
2.9	Antiparticules	33
3	Annexe	35
3.1	Théorème du viriel	35

1 Théorie de Klein-Gordon

1.1 Equation de Klein-Gordon et courant conservé

Soit $\phi(x)$ un champ scalaire. L'équation de Klein-Gordon est celle qui décrit les particules de spin 0. Elle est donnée par

$$(\square + m^2)\phi(x) = 0, \quad (1)$$

avec $\square = \partial_\mu \partial^\mu$. Cette équation est manifestement covariante étant donné que l'opérateur \square est invariant et que le champ ϕ est scalaire. Il existe un courant conservé par les champs vérifiant l'équation de Klein-Gordon. En effet, en posant

$$j^\mu = \frac{i}{2m}(\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^*) \quad (2)$$

on voit que

$$\partial_\mu j^\mu = \frac{i}{2m}(\partial_\mu \phi^* \partial^\mu \phi + \phi^* \square \phi - \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi^* - \phi \square \phi^*) = \frac{i}{2m}(\phi^* \square \phi - \phi \square \phi^*) = 0 \quad (3)$$

où l'on a utilisé l'équation de Klein-Gordon pour la dernière égalité. En posant $j^0 = \rho$, on en déduit facilement que

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \, dV = - \int_S \vec{j} \cdot d\vec{S} = 0 \quad (4)$$

en supposant que les champs soient locaux. Ainsi, comme en mécanique quantique non relativiste, on aurait envie d'interpréter ρ comme une densité de probabilité à une particule. Toutefois, on peut très vite se rendre compte qu'on rencontre des problèmes avec une telle interprétation directe. En effet, si l'on considère une onde plane $\phi(x) = \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x} - iEt)$, l'équation de Klein-Gordon implique immédiatement que

$$E^2 = \vec{p}^2 + m^2 \quad (5)$$

et donc $E = \pm \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$. De plus, le calcul du courant sur cette onde plane donne

$$j^\mu = \left(\frac{E}{m}, \frac{\vec{p}}{m} \right) = \frac{p^\mu}{m}, \quad (6)$$

et donc $\rho = E/m$ peut être soit positif, soit négatif, dépendant du signe de l'énergie. Une densité de probabilité négative semble évidemment insatisfaisante. On verra par la suite que l'introduction des antiparticules lève ce problème.

1.2 Solutions libres

Nous avons développé jusque là une théorie libre, c'est à dire ne faisant intervenir aucune interaction. On verra plus loin comment introduire l'interaction électromagnétique dans cette équation. Pour le moment, on va s'intéresser aux solutions de l'équation libre (1). Pour ce faire, on va passer dans l'espace de Fourier. La transformée de Fourier de $\phi(x)$ est définie par

$$\tilde{\phi}(k, t) = \int \phi(x, t) e^{ik_\mu x^\mu} d^4x, \quad (7)$$

son inverse est donc

$$\phi(x, t) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \tilde{\phi}(k, t) e^{-ik_\mu x^\mu}. \quad (8)$$

En utilisant la représentation (8) pour $\phi(x)$ et en appliquant l'équation (1), on trouve que

$$k_\mu k^\mu = k^2 = m^2. \quad (9)$$

Cette équation fixe l'énergie de l'onde car elle donne $E_\pm = \pm \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$. L'introduction de cette contrainte peut se faire de manière naturelle en modifiant l'équation (8). On écrit alors

$$\phi(x, t) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \tilde{\phi}(k, t) e^{-ik_\mu x^\mu} (2\pi) \delta(k^2 - m^2) \quad (10)$$

où le facteur 2π est introduit par souci de normalisation de la fonction δ . En utilisant le fait que cette fonction delta peut s'écrire de manière plus agréable comme

$$\delta(k^2 - m^2) = \frac{1}{2E} (\delta(k_0 - E_+) + \delta(k_0 - E_-)). \quad (11)$$

où l'on a défini $E = |E_\pm|$. La fonction ϕ solution de l'équation de Klein Gordon peut alors s'écrire sous la forme générale

$$\phi(x, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 \cdot 2E} \left[a(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - Et)} + b(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} + Et)} \right] \quad (12)$$

où les fonctions $a(\vec{k})$, $b(\vec{k})$ sont deux fonctions indépendantes, vu que le champ est complexe. Si le champ était réel, $a(\vec{k})$ et $b^*(\vec{k})$ seraient identifiés. A ce stade, il est très important de remarquer que la fonction ϕ comprend une superposition d'onde d'énergies positives *et* d'ondes d'énergies négatives.

1.3 Interaction électromagnétique

On aimerait maintenant pouvoir généraliser l'équation (1) en introduisant l'interaction de la fonction ϕ avec un champ électromagnétique. On sait de la physique quantique traditionnelle qu'en présence d'un potentiel externe $A^\mu = (A^0, \vec{A})$ le moment canonique $p_\mu = i\partial_\mu$ devient $i(\partial_\mu + iqA_\mu)$ où q est la charge de la particule représentée par la fonction ϕ . On définit alors la dérivée covariante comme

$$D_\mu = \partial_\mu + iqA_\mu \quad (13)$$

et on généralise l'équation de Klein-Gordon en remplaçant ∂_μ par D_μ . On a ainsi

$$(D_\mu D^\mu + m^2)\phi(x) = 0. \quad (14)$$

On peut facilement voir que le courant conservé associé à cette équation s'obtient en remplaçant ∂_μ par D_μ dans l'ancien courant. Ce qui s'écrit

$$J^\mu = \frac{i}{2m} (\phi^* D^\mu \phi - \phi (D^\mu \phi)^*), \quad (15)$$

avec $\partial_\mu J^\mu = 0$. Ainsi, la densité de probabilité $j^0 = \rho$ associée est

$$\rho = \frac{i}{2m} (\phi^* (\partial_t + iqA_0)\phi - \phi (\partial_t - iqA_0)\phi^*). \quad (16)$$

Comme il est évident que D_μ se transforme comme un quadrivecteur, la nouvelle équation est manifestement covariante sous transformation de Lorentz. On pourrait également montrer que la parité, le renversement temporel et les transformations de jauge sont des symétries de cette équation.

1.4 Limite non relativiste

Il est possible de définir une limite non relativiste de l'équation (14) de Klein-Gordon. Il existe essentiellement deux méthodes pour y arriver. La première est une procédure, due à Foldy-Wouthuysen, de développement systématique dans des puissances inverses de la masse qui mène à une expression en série entière du Hamiltonien final. Cette méthode est très calculatoire, mais a l'avantage d'être systématique. Il existe une autre méthode moins systématique, mais plus simple, qui permet d'obtenir facilement les premiers termes du développement. C'est cette dernière méthode qui est présentée ici.

On commence par remarquer que l'équation de Klein-Gordon peut se mettre sous la forme

$$[i\partial_t - qA_0]^2 \phi(x) = \left[m^2 + (\vec{p} - q\vec{A})^2 \right] \phi(x) \quad (17)$$

où $p^i = -i \frac{\partial}{\partial x^i}$. L'équation étant du deuxième degré en temps, on sait qu'il est possible de la découpler en deux équations du premier degré. On définit alors $\varphi = \phi$ et $\xi = \frac{i}{m}(\partial_t + iqA_0)\phi$. L'équation (17) mène à

$$i(\partial_t + iqA_0)\varphi = m\xi \quad (18)$$

$$i(\partial_t + iqA_0)\xi = \left[m + \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{m} \right] \varphi \quad (19)$$

Enfin, on crée des combinaisons linéaires en définissant que $\varphi = \theta_* + \chi_*$ et $\xi = \theta_* - \chi_*$, où θ_* et χ_* sont deux fonctions, puis on introduit le vecteur $\psi(x) = (\theta_*, \chi_*)$. On peut alors écrire ce système sous forme d'une équation de Schrödinger :

$$i\partial_t \psi_a(x) = H_{ab} \psi_b(x) \quad (20)$$

où $a, b = 1, 2$ et le Hamiltonien est

$$H = \begin{pmatrix} \left[m + \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} \right] + qA_0 & \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} \\ -\frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} & -\left[m + \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} \right] + qA_0 \end{pmatrix} \quad (21)$$

On explicite finalement le système pour trouver

$$i\partial_t \theta_* = \left[m + \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + qA_0 \right] \theta_* + \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} \chi_* \quad (22)$$

$$i\partial_t \chi_* = -\left[m + \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} - qA_0 \right] \chi_* - \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} \theta_* \quad (23)$$

A partir de ces expressions, la limite non relativiste peut être obtenue moyennant quelques calculs. Tout d'abord, on va commencer par se débarrasser de la dérivée temporelle. On écrit donc que $\psi(x, t) = \exp[-iEt] \psi_{nr}(x)$ avec $E = m + \varepsilon$ et $\psi_{nr}(x) = (\theta(x), \chi(x))$. les inconnues du problème sont maintenant les fonctions χ , θ ainsi que l'énergie ε . Avec ces nouvelles définitions, on aboutit au système

$$(m + \varepsilon)\theta = \left[m + \frac{\vec{\Pi}^2}{2m} + qA_0 \right] \theta + \frac{\vec{\Pi}^2}{2m} \chi \quad (24)$$

$$(m + \varepsilon)\chi = -\left[m + \frac{\vec{\Pi}^2}{2m} - qA_0 \right] \chi - \frac{\vec{\Pi}^2}{2m} \theta \quad (25)$$

où l'on a défini $\vec{\Pi} = \vec{p} - q\vec{A}$. La limite non relativiste consiste à dire que l'énergie ε est petite devant la masse, que les champs ϕ et \vec{A} sont faibles par rapport à la masse et que la variation spatiale des quantités est faible. En passant dans l'espace de Fourier, tous les opérateurs présents dans les équations (24) et (25) deviennent des nombres. On peut ainsi résumer nos hypothèses par $\varepsilon \ll m$, $|A_0| \ll m$, $|\vec{A}| \ll m$ et $|\vec{p}| \ll m$, ce qui entraîne $|\vec{\Pi}| \ll m$.

Sans passer dans l'espace de Fourier, on va travailler avec l'opérateur $\vec{\Pi}$ comme un nombre et on le ré-interprétera comme un opérateur à la fin du calcul. Comme à partir de maintenant ce sera toujours le cas, on ne mentionnera plus la subtilité. Le but est maintenant de trouver des équations pour nos quantités, en allant à l'ordre $1/m^4$ au maximum. En rappelant qu'au premier ordre $1/(1+x) \simeq 1-x$, (25) donne

$$\chi = -\frac{1}{2m} \left(1 + \frac{\vec{\Pi}^2}{4m^2} + \frac{qA_0}{2m} - \frac{\varepsilon}{m} \right) \frac{\vec{\Pi}^2}{2m} \theta, \quad (26)$$

et on pourrait vérifier par la suite qu'il ne sert à rien de développer à un ordre plus élevé pour cette équation. En remplaçant dans (24) on trouve

$$\varepsilon \left(1 - \frac{\vec{\Pi}^2}{16m^4} \right) \theta = \left(\frac{\vec{\Pi}^2}{2m} - \frac{\vec{\Pi}^4}{8m^3} + qA_0 - \frac{\vec{\Pi}^2 qA_0 \vec{\Pi}^2}{16m^4} \right) \theta \quad (27)$$

Pour respecter la physique, on cherche une fonction qui soit proprement normée. La densité de probabilité ρ donnée par (16) peut s'exprimer dans les nouvelles variables comme $\rho = (\theta^* \theta - \chi^* \chi)$. Les conditions de normalisations étant que $\int \rho \, d^3x = 1$, on doit avoir que $\int (\theta^* \theta - \chi^* \chi) d^3x = 1$. Mais comme $\chi \simeq -\frac{\vec{\Pi}^2}{4m^2} \theta$ il vient

$$\int \theta^* \left(1 - \frac{\vec{\Pi}^4}{16m^4} \right) \theta \, d^3x = 1. \quad (28)$$

On définit alors

$$\tilde{\theta} = \left(1 - \frac{\vec{\Pi}^4}{32m^4} \right) \theta \quad \Leftrightarrow \quad \theta = \left(1 + \frac{\vec{\Pi}^4}{32m^4} \right) \tilde{\theta} \quad (29)$$

où la dernière relation est vraie à l'ordre $1/m^4$ seulement. La fonction $\tilde{\theta}$ est proprement normée et c'est donc l'état physique cherché. En remplaçant dans (27) et après quelques manipulations, on arrive à

$$\varepsilon \tilde{\theta} = \left(\frac{\vec{\Pi}^2}{2m} - \frac{\vec{\Pi}^4}{8m^3} + qA_0 + \frac{\vec{\Pi}^4 qA_0}{32m^4} + \frac{qA_0 \vec{\Pi}^4}{32m^4} - \frac{\vec{\Pi}^2 qA_0 \vec{\Pi}^2}{16m^4} \right) \tilde{\theta}. \quad (30)$$

En remarquant finalement que

$$\left[\vec{\Pi}^2, \left[\vec{\Pi}^2, A_0 \right] \right] = \vec{\Pi}^4 A_0 + A_0 \vec{\Pi}^4 - 2\vec{\Pi}^2 A_0 \vec{\Pi}^2 \quad (31)$$

et en se rappelant la définition de $\vec{\Pi}$, il faut résoudre $\vec{H}\tilde{\theta} = \varepsilon\tilde{\theta}$ avec

$$\vec{H} = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} - \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^4}{8m^3} + qA_0 + \frac{1}{32m^4} \left[(\vec{p} - q\vec{A})^2, \left[(\vec{p} - q\vec{A})^2, qA_0 \right] \right]. \quad (32)$$

Le premier terme est l'énergie cinétique non relativiste et le deuxième est la première correction relativiste. Le troisième terme est simplement l'énergie potentielle tandis que le dernier terme est un effet purement quantique. On pourrait en effet montrer que ce terme est lié au Zitterbewegung, effet de tremblement de la trajectoire que l'on étudiera plus loin. Notons finalement que ce qui nous intéresse en général, ce n'est pas tant les fonctions d'ondes d'un système mais plutôt son spectre. Ainsi, pour ce qui nous intéresse, il nous suffit de déterminer le spectre de \tilde{H} .

1.5 Atomes mésoniques

Des atomes de spin zéro peuvent exister dans la nature quand un π^- ou un K^- est capturé par un noyau. On peut calculer approximativement le spectre de ces systèmes en utilisant la formule trouvée pour \tilde{H} . Dans ce problème, le champ magnétique est nul et le potentiel est Coulombien. On prend donc $\vec{A} = 0$ et $qA_0 = -\frac{Z\alpha}{r}$ avec Z le nombre de protons et on rappelle que $\alpha = 1/137$. Il faut alors résoudre le spectre de

$$\tilde{H} = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Z\alpha}{r}}_{H_0} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3} + \frac{1}{32m^4} [\vec{p}^2, [\vec{p}^2, qA_0]]. \quad (33)$$

Le spectre de H_0 est connu car c'est celui de l'atome d'hydrogène avec $Z \neq 1$. Il est donné par

$$E_n = -\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2}m, \quad (34)$$

avec

$$H_0\psi_n(\vec{r}) = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Z\alpha}{r}\right)\psi_n(\vec{r}) = E_n\psi_n(\vec{r}). \quad (35)$$

On va alors traiter les deux termes différents de H_0 en perturbation. Mais,

$$\frac{\vec{p}^4}{8m^3}\psi_n(\vec{r}) = \frac{1}{2m} \left(E_n + \frac{Z\alpha}{r}\right)^2 \psi_n(\vec{r}) = \frac{1}{2m} \left(m^2 \frac{Z^4\alpha^4}{4n^2} - m \frac{Z^3\alpha^3}{n^2r} + \frac{Z^2\alpha^2}{r^2}\right) \psi_n(\vec{r}) \quad (36)$$

et l'on sait de l'atome d'hydrogène que

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = m \frac{Z\alpha}{n^2}, \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = m^2 \frac{Z^2\alpha^2}{n^3(l + \frac{1}{2})}, \quad (37)$$

où $\langle . \rangle$ signifie la moyenne sur l'état ψ_n . On arrive donc à

$$\left\langle \frac{\vec{p}^4}{8m^3} \right\rangle = \frac{mZ^4\alpha^4}{2n^3} \left(\frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right). \quad (38)$$

En utilisant le fait que $\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r})$, on voit que $[\vec{p}^2, qA_0] = -4\pi Z\alpha\delta(\vec{r})$.
Donc,

$$\langle [\vec{p}^2, [\vec{p}^2, qA_0]] \rangle = 4\pi Z\alpha \int \delta(\vec{r}) ((\nabla^2 \psi_n^*(\vec{r})) \psi_n(\vec{r}) - \psi_n^*(\vec{r}) \nabla^2 \psi_n(\vec{r})) d^3r = 0. \quad (39)$$

Il n'y a ainsi pas de contribution du Zitterbewegung. Finalement, le spectre de \tilde{H} , qui est la correction à l'énergie de masse, s'écrit

$$\varepsilon_{nl} = -m \frac{Z^2 \alpha^2}{2n^2} \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right] \quad (40)$$

On observe que le terme en \vec{p}^4 agit comme un terme de structure fine vu qu'il lève la dégénérescence en l de l'atome d'hydrogène.

Il existe également une solution exacte à ce problème, qu'on peut obtenir en écrivant l'équation stationnaire de Klein-Gordon :

$$\left(\left(E + \frac{Z\alpha}{r} \right)^2 + \nabla^2 - m^2 \right) \psi(\vec{r}) = 0. \quad (41)$$

Comme le problème est à symétrie sphérique, l'idée est de partir comme usuellement avec des fonctions dont la dépendance angulaire et la dépendance en r sont découplées. Moyennant quelques identifications, on peut se ramener à l'équation de l'atome d'hydrogène mais avec un nouveau l qui devient continu. On prolonge ensuite analytiquement la solution de l'atome d'hydrogène pour obtenir une expression exacte de l'énergie E . Les calculs détaillés sont fait dans [1] section VI.3 et ils donnent

$$E = m \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{\left(n - l - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - Z^2 \alpha^2} \right)^2} \right]^{-1/2} \quad (42)$$

Dans le développement perturbatif nous avons supposé que l'énergie cinétique était petite, ce qui s'écrit $\vec{p}^2/2m \ll 1$. On peut alors se demander quelle quantité doit être petite ici afin de retrouver le développement perturbatif. Le théorème du viriel nous donne (voir Annexes), $\langle V \rangle = -2\langle T \rangle$, où T est l'énergie cinétique, tandis que l'équation (37) nous permet d'affirmer que $\langle V \rangle \sim -mZ^2\alpha^2$. On voit donc que $\vec{p}^2/2m \sim mZ^2\alpha^2$ ce qui implique qu'il faut développer la solution dans le petit paramètre $Z^2\alpha^2$, ce qui est cohérent avec la limite non relativiste où on avait supposé que $|qA_0| \ll m$. En effectuant le développement, on peut voir que l'on retrouve immédiatement la solution perturbative.

On peut enfin se demander si la formule que nous avons trouvée est cohérente. En étudiant le ground state ($n = 1, l = 0$) on voit que les énergies

deviennent complexes à partir de $Z = 69$, car $\alpha = 1/137$. A partir de $Z = 69$ on peut écrire l'énergie comme $E = E_0 + i\Gamma/2$ et l'état propre prend la forme générale

$$\psi(r) = e^{iEt} \phi(r) = e^{iE_0 t - \frac{\Gamma}{2} t} \phi(r). \quad (43)$$

Si l'on suppose que $\psi(r)$ est normé au temps $t = 0$, on a alors $\int |\phi(r)|^2 d^3r = 1$, et donc au temps t la probabilité totale d'observer l'état ψ est

$$P = \int |\psi|^2 d^3r = e^{-\Gamma t}. \quad (44)$$

Des énergies complexes représentent alors le fait que l'état n'est pas stable et qu'il se désintègre avec un temps de vie $\tau = 1/\Gamma$. Ces résultats sont tout à fait similaires à la théorie des états métastables de l'approximation semi-classique de la physique quantique non relativiste. Notre théorie prédit ainsi que les atomes mésoniques sont instables à partir de $Z = 69$. Remarquons que, à partir de $Z = 69$, $\langle V \rangle \sim m$ et que les phénomènes de créations de paires ne peuvent être négligés (c.f. section 1.7). Il se trouve que l'on a pu observer des atomes mésoniques assez stables ayant $Z = 82$ ou encore $Z = 92$. Cette théorie n'est donc pas parfaite et devrait être modifiée. Un petit calcul simple montre que pour un méson π le rayon de Bohr vaut 2.8 fm à $Z = 69$, alors que le rayon du noyau est $R = 1.2 \cdot A^{1/3} \simeq 5$ fm. En d'autres termes, un modèle de noyau ponctuel ne pourra jamais donner un bon résultat. Il faudrait alors modifier notre modèle en travaillant avec la masse réduite et non la masse, ou encore prendre en compte que le noyau n'est pas ponctuel, ainsi que considérer les phénomènes de créations de paires etc...

1.6 Zitterbewegung

Il existe un effet quantique remarquable contenu dans l'équation de Klein-Gordon qui donne lieu à un tremblement de la particule libre sur la trajectoire, ou *Zitterbewegung*. La manière la plus commune d'exhiber cet effet est de calculer directement la position moyenne d'un paquet d'ondes et de montrer qu'on trouve une fluctuation de la trajectoire de l'ordre de $1/m$.

Le *Zitterbewegung* peut également être mis en avant à l'aide d'une explicitation purement algébrique de l'opérateur position en faisant intervenir le point de vue de Heisenberg de la mécanique quantique. Soit $A(t)$ un opérateur dans la vision de Heisenberg, relié à l'opérateur A indépendant du temps de la vision de Schrödinger par la relation

$$A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt} \quad (45)$$

où l'on a supposé que le Hamiltonien est indépendant du temps. La dérivée de l'opérateur $A(t)$ peut s'écrire comme

$$\frac{dA(t)}{dt} = i[H, A(t)] + \frac{\partial A(t)}{\partial t} \quad (46)$$

Revenons maintenant au problème physique. Si l'on suppose, dans la formulation à deux composantes, que la particule est libre alors le Hamiltonien (21) prend la forme

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} (\sigma^3 + i\sigma^2) + m\sigma^3 \quad (47)$$

où les σ^i sont les matrices de Pauli. L'opérateur vitesse de la particule s'exprime comme

$$\vec{v}(t) = \frac{d\vec{x}(t)}{dt} = i[H, \vec{x}(t)] = (\sigma^3(t) + i\sigma^2(t)) \frac{\vec{p}(t)}{m}. \quad (48)$$

En remarquant que

$$H\vec{v}(t) + \vec{v}(t)H = 2\vec{p} \quad (49)$$

On obtient que

$$\frac{d\vec{v}(t)}{dt} = i[H, \vec{v}(t)] = i(H\vec{v}(t) + \vec{v}(t)H) - 2i\vec{v}(t)H = 2i\vec{p} - 2i\vec{v}(t)H. \quad (50)$$

On note $\vec{v}_0 = \vec{v}(t=0)$, et on pose $\vec{\alpha}(t) = \vec{p}H^{-1} + (\vec{v}_0 - \vec{p}H^{-1})e^{-2iHt}$. En voyant que (49) peut s'écrire

$$H(\vec{v}(t) - \vec{p}H^{-1}) = -(\vec{v}(t) - \vec{p}H^{-1})H \quad (51)$$

car $[\vec{p}, H] = 0$, et comme $[H, \vec{\alpha}(t)] = 0$ on a

$$\frac{d\vec{\alpha}(t)}{dt} = (\vec{v}_0 - \vec{p}H^{-1})e^{-2iHt}(-2iH) = e^{iHt}(\vec{v}_0 - \vec{p}H^{-1})e^{-iHt}(-2iH) = 2i\vec{p} - 2i\vec{v}(t)H. \quad (52)$$

De plus, comme $\vec{\alpha}(t=0) = \vec{v}_0$, on doit forcément avoir

$$\vec{v}(t) = \vec{\alpha}(t) = \vec{p}H^{-1} + (\vec{v}_0 - \vec{p}H^{-1})e^{-2iHt}. \quad (53)$$

En posant $\vec{x}(t=0) = \vec{x}_0$ et en notant symboliquement $H^{-1} = 1/H$, une simple intégration de cette dernière expression mène à

$$\vec{x}(t) = \vec{x}_0 + \frac{\vec{p}t}{H} - \left(\vec{v}_0 - \frac{\vec{p}}{H} \right) \frac{e^{-2iHt} - 1}{2iH}. \quad (54)$$

On voit alors que l'opérateur position est composé d'une partie de translation à vitesse constante ainsi que d'une partie oscillante, le Zitterbewegung. Il est à ce stade possible de calculer la moyenne de cet opérateur position sur un paquet d'ondes afin de retrouver la formule usuellement énoncée. Ce calcul est également instructif d'un autre point de vue, car on va se rendre compte que le calcul de moyennes d'opérateurs est un peu plus subtil qu'en mécanique quantique traditionnel. On pose $\psi = (\theta_*, \chi_*)$, comme à la section 1.4. On peut alors exprimer la densité de probabilité comme

$\rho = |\theta_*|^2 - |\chi_*|^2 = \psi^\dagger \sigma^3 \psi$. On voit donc que le produit scalaire usuel doit être modifié en insérant une matrice σ^3 afin que la normalisation $\int \rho d^3r = 1$ soit valable. Ainsi, dans la formulation à deux composantes, la moyenne d'un opérateur A s'exprime comme

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int \psi^\dagger \sigma^3 A \psi d^3r. \quad (55)$$

En revenant aux définitions des fonctions θ_* et χ_* de la section 1.4, on voit qu'en terme de la fonction d'onde ϕ à une composante ψ s'écrit

$$\psi(x) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \phi(x) + \frac{i}{m} \partial_t \phi(x) \\ \phi(x) - \frac{i}{m} \partial_t \phi(x) \end{pmatrix}. \quad (56)$$

vu que $A_0 = 0$. Lors de l'étude des solutions libres, on a vu qu'on peut écrire $\phi(x)$ comme

$$\phi(x, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{m}{E}} \left[a_{\vec{k}}^+ e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - Et)} + a_{\vec{k}}^- e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} + Et)} \right] \quad (57)$$

où l'on a redéfini les coefficients devant les exponentielles et on rappelle que $E = \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$. En définissant

$$\chi^\sigma(\vec{k}) = \frac{1}{2\sqrt{mE}} \begin{pmatrix} m + \sigma E \\ m - \sigma E \end{pmatrix} \quad (58)$$

où $\sigma = \pm 1$, ψ devient alors

$$\psi(x, t) = \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} a_{\vec{k}}^\sigma(t) \chi^\sigma(\vec{k}), \quad (59)$$

où $a_{\vec{k}}^\sigma(t)$ signifie que la dépendance temporelle se trouve dans les fonctions $a_{\vec{k}}^\sigma$. Si l'on veut calculer la moyenne $\langle x(t) \rangle$ il faut se placer en représentation de Heisenberg. L'évolution temporelle devant se trouver dans les opérateurs, on se place en $t = 0$ pour calculer la moyenne de $\vec{x}(t)$. En utilisant la définition (55) sur la fonction $\psi(x) = \psi(x, t = 0)$ ainsi que (48) et le fait que $(\chi^\sigma)^\dagger \sigma^3 \chi^{\sigma*} = \sigma \delta_{\sigma, \sigma*}$ le calcul donnerait (c.f [8])

$$\begin{aligned} \langle \psi(x) | \vec{x}(t) | \psi(x) \rangle &= \langle \vec{x}_0 \rangle + \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\vec{k}}{E} t \sigma |a_{\vec{k}}^\sigma(t)|^2 \\ &+ 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\vec{k}}{E^2} \sin(Et) \Re \left[a_{\vec{k}}^{-*} a_{\vec{k}}^+ e^{-iEt} \right] \end{aligned} \quad (60)$$

Si on avait opté pour la vision de Schrödinger, nous aurions également pu calculer la moyenne de l'opérateur \vec{x} . Un long calcul nous aurait alors mené à

$$\langle \psi(x, t) | \vec{x} | \psi(x, t) \rangle = \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\vec{k}}{E} t \sigma |a_{\vec{k}}^\sigma(t)|^2 - \Re \left[i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\vec{k}}{E^2} a_{\vec{k}}^{+*}(t) a_{\vec{k}}^-(t) \right] \quad (61)$$

On peut évidemment montrer que la moyenne de $\vec{x}(t)$ calculée dans la vision de Heisenberg ou dans la vision de Schrödinger est identique. La première composante de cette moyenne est simplement le mouvement à vitesse uniforme du paquet. La deuxième composante de (61) est par contre telle que

$$a_k^{+*}(t)a_k^-(t) \sim e^{2iEt} \quad (62)$$

et représente ainsi une oscillation δx très rapide ($\omega \geq 2m$) de la position de la particule autour de la position centrale. Ce mouvement d'oscillation est clairement dû aux interférences entre les parties à énergies positives et les parties à énergies négatives. De plus, on voit facilement que $\delta x \sim 1/m$.

1.7 Antiparticules

Afin de se rendre compte que l'équation de Klein-Gordon contient effectivement la description de particules *et* d'antiparticules, le plus simple est de prendre un exemple dans lequel on voit la nécessité d'interpréter la présence d'antiparticules.

Soit une particule de Klein-Gordon de masse m , charge e et énergie $E = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$ incidente sur une marche de potentiel

$$V(x) = V_0\theta(x) = eA^0(x). \quad (63)$$

On a vu à l'équation (57) que la solution libre était composée de deux paquets d'ondes, un avec énergies positives et un avec énergies négatives. Nous allons considérer que la particule incidente sur le potentiel a une énergie positive. La solution peut alors s'écrire comme

$$\phi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + a e^{-ikx} & \text{si } x < 0 & k = \sqrt{E^2 - m^2} \\ b e^{iqx} & \text{si } x > 0 & q = \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2} \end{cases} \quad (64)$$

Comme habituellement, il faut maintenant imposer que ϕ et sa dérivée sont continues en 0, ce qui permet de résoudre le système pour les coefficients a et b . Les coefficients de transmission et de réflexion peuvent alors se calculer et valent

$$T = \frac{q}{k} |b|^2 = \frac{4q}{k \left| 1 + \frac{q}{k} \right|^2} \quad (65)$$

$$R = |a|^2 = \left| \frac{1 - \frac{q}{k}}{1 + \frac{q}{k}} \right|^2 \quad (66)$$

Il y a maintenant 3 cas différents à considérer :

1. $0 \leq V_0 \leq E - m$: L'énergie cinétique est plus grande que la barrière. Dans ce cas k et q sont réels et on a

$$T = \frac{4qk}{(k+q)^2} \in [0, 1], \quad R = \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 \in [0, 1], \quad R + T = 1. \quad (67)$$

L'onde incidente est partiellement réfléchiée et partiellement transmise, comme en mécanique quantique non relativiste.

2. $E - m \leq V_0 \leq E + m$: Dans ce cas q devient imaginaire et on trouve que

$$T = 0, \quad R = 1, \quad R + T = 1. \quad (68)$$

L'onde incidente est totalement réfléchiée, ce qui est analogue au cas non relativiste.

3. $E + m \leq V_0$: Dans ce cas q redevient réel mais il faut le choisir *néglatif* pour que $R + T = 1$, avec

$$R = \left(\frac{k + |q|}{k - |q|} \right)^2 > 1, \quad T = -\frac{4k|q|}{(k - |q|)^2} < 0. \quad (69)$$

La probabilité est toujours conservée mais ceci nous coûte un coefficient de transmission négatif et un coefficient de réflexion plus grand que 1.

L'interprétation de ce dernier cas est que des paires à énergies positives et négatives sont produites par l'interaction avec le potentiel. On voit que ce phénomène a lieu lorsque la barrière de potentiel est grande, c'est à dire lorsque la localisation de la fonction d'onde est très forte à droite de la barrière. La partie à énergie positive repart vers la gauche et s'additionne à l'onde réfléchiée pour donner $R > 1$. La partie à énergie négative remonte vers la droite et donne $T < 0$. On peut expliquer ceci par le fait que la première correspond à une particule de charge q qui subit le potentiel $V(x)$ et contribue de manière positive au courant électrique, tandis que la deuxième correspond à une antiparticule de charge $-q$, subissant l'opposé du potentiel et contribuant de façon négative au courant électrique. Il faut donc se résoudre au fait que l'interprétation de la fonction d'onde ϕ comme une densité à une particule mène forcément à des complications étant donné que nous sommes confrontés à un problème à plusieurs particules.

On pourrait formaliser cette exemple de façon générale en considérant la relation entre les solutions à énergies positives (particules) et négatives (antiparticules) en présence d'un champ externe dans une procédure appelée *conjugaison de charge*. Nous ne le ferons pas ici et renvoyons le lecteur à [2] par exemple. Mentionnons finalement que la seule manière de traiter proprement ce problème se fait via le formalisme de la théorie quantique des champs.

2 Théorie de Dirac

2.1 Equation de Dirac et courant conservé

Soit $\psi(x)$ un vecteur à 4 composantes, que l'on appelle spineur. L'équation de Dirac est donnée par

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x) = 0. \quad (70)$$

La quantité γ^μ est un 4-vecteurs de matrices 4×4 , agissant sur la fonction d'onde ψ comme sur un vecteur. Ces matrices γ^μ restent encore à être trouvées. Afin de déterminer les propriétés que doivent satisfaire les γ^μ , on commence par imposer que l'équation de Dirac doit impliquer celle de Klein-Gordon. Pour ce faire, on va appliquer l'opérateur $(-i\gamma^\mu \partial_\mu - m)$ sur l'équation (70). On trouve

$$(\gamma^\mu \gamma^\nu \partial_\mu \partial_\nu + m^2)\psi(x) = 0 \quad (71)$$

En utilisant le fait que les dérivées commutent, on peut ré-écrire cette équation

$$\left(\frac{1}{2} \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \partial_\mu \partial_\nu + m^2 \right) \psi(x) = 0, \quad (72)$$

où $\{\cdot, \cdot\}$ signifie l'anticommutateur. En comparant à l'équation de Klein-Gordon qui s'écrit $(\eta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu + m^2)\psi(x) = 0$, on en déduit que les matrices γ^μ doivent satisfaire l'algèbre de Clifford :

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu} \mathbb{1}. \quad (73)$$

On a noté $\mathbb{1}$ la matrice identité 4×4 , que l'on omettra dès lors. On voit donc que $(\gamma^0)^2 = \mathbb{1}$ et que $(\gamma^i)^2 = -1$. On peut choisir les matrices γ^μ de telle sorte que γ^0 soit hermitienne et que les γ^i soient anti-hermitiennes, ce qui se résume par

$$\gamma^{\mu\dagger} = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0. \quad (74)$$

L'algèbre de Clifford n'a pas de solution unique. En effet, on voit facilement que les matrices

$$\tilde{\gamma}^\mu = U \gamma^\mu U^{-1}, \quad (75)$$

avec U une matrice inversible arbitraire, satisfont aussi l'algèbre de Clifford. Il existe un théorème d'unicité des représentations de l'algèbre de Clifford qui affirme que toute paire de matrices γ^μ et $\tilde{\gamma}^\mu$ la satisfaisant est reliée par une conjugaison du type (75). On remarquera de plus que, si la matrice U est unitaire, alors les matrices $\tilde{\gamma}^\mu$ ont aussi la propriété que $\tilde{\gamma}^{\mu\dagger} = \tilde{\gamma}^0 \tilde{\gamma}^\mu \tilde{\gamma}^0$.

Comme première vérification que l'équation de Dirac n'est pas absurde, on peut voir qu'elle donne lieu à un Hamiltonien hermitien. En effet, l'équation peut s'écrire

$$i\partial_t \psi(x) = H\psi(x) \quad (76)$$

avec

$$H = m\gamma^0 - i\gamma^0\gamma^i\partial_i. \quad (77)$$

En utilisant le fait que $\gamma^{0\dagger} = \gamma^0$ et que $(\gamma^0\gamma^i)^\dagger = \gamma^0\gamma^i$ on voit facilement que $H = H^\dagger$.

Comme pour l'équation de Klein-Gordon, il existe un courant conservé par les fonction $\psi(x)$ vérifiant l'équation de Dirac. On pose

$$j^\mu = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \psi \quad (78)$$

et on vérifie en effet que $\partial_\mu j^\mu = 0$. Il s'ensuit que, comme d'habitude, la composante 0 de j^μ intégrée sur tout l'espace devient une quantité conservée. La densité $\rho = j^0$ s'écrit

$$\rho = \psi^\dagger \psi. \quad (79)$$

On verra que l'interprétation de ρ comme densité de probabilité à une particule mène aux mêmes problèmes que dans le cas du champ de Klein-Gordon. En ce qui concerne le produit scalaire, contrairement au cas de Klein-Gordon, on remarque que celui-ci ne doit pas être modifié pour calculer la densité ρ . Il en découle que le calcul des moyennes d'opérateurs ne comporte aucune subtilité et donc que pour un opérateur A on a

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int \psi^\dagger A \psi \, d^3x. \quad (80)$$

On remarquera enfin que n'importe quel changement de base de type (75) laisse la densité de courant inchangée si les fonctions d'ondes sont modifiées en $\tilde{\psi} = U\psi$ et que la matrice U est unitaire. Ceci montre clairement que toutes les prédictions physiques de la théorie de Dirac dépendent uniquement des propriétés algébriques des matrices γ^μ .

On va maintenant faire une construction un peu plus explicite des matrices γ^μ . Il est possible de démontrer qu'il faut que ces matrices soient de dimension paire. Pour $d = 2$, on sait que les matrices de Pauli satisfont l'algèbre de Clifford, $\{\sigma^i, \sigma^j\} = 2\delta^{ij}$. Mais comme il n'existe pas d'autres matrices de dimension 2 qui anticommulent avec les trois matrices σ^i , l'algèbre de Clifford ne peut pas être réalisée en dimension 2. En dimension 4 par contre, il est possible de trouver des représentations de l'algèbre de Clifford. Il existe en effet 5 matrices indépendantes qui anticommulent entre elles. On peut en identifier 4 aux matrices γ^μ et choisir la dernière comme

$$\gamma^5 = -i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3. \quad (81)$$

Des propriétés des matrices γ^μ on en déduit que $\{\gamma^\mu, \gamma^5\} = 0$, $(\gamma^5)^2 = \mathbb{1}$ et $\gamma^{5\dagger} = \gamma^5$.

Il existe deux représentations utiles en physique. La première est appelée *représentation standard* et elle peut être donnée en bloc 2×2 par

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (82)$$

La deuxième est appelée *représentation de Weyl* et est définie par

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^5 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}. \quad (83)$$

La représentation standard est plus utile pour étudier les solutions de l'équation de Dirac ainsi que sa limite non relativiste. La représentation de Weyl permet, quant à elle, d'étudier les propriétés de transformations de l'équation de Dirac. On peut évidemment passer d'une représentation à l'autre en utilisant une conjugaison du type (75).

2.2 Interaction électromagnétique et covariance

Comme dans le cas de Klein-Gordon, on aimerait généraliser l'équation de Dirac pour rendre compte d'une éventuelle interaction électromagnétique. En se rappelant que la dérivée covariante est donnée par

$$D_\mu = \partial_\mu + iqA_\mu \quad (84)$$

la généralisation la plus naturelle est

$$(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi(x) = 0. \quad (85)$$

Un élément très essentiel à discuter est la covariance de l'équation de Dirac (85). Dans le cas de Klein-Gordon, cette covariance était manifeste. Ici, il va falloir montrer que, sous une transformation de Lorentz propre, il doit exister une transformation de la fonction d'onde telle que la nouvelle équation soit équivalente à celle de base. On commence par remarquer que la dérivée covariante se transforme comme $D_\mu \rightarrow \tilde{D}_\mu = \Lambda_\mu^\nu D_\nu$ sous transformation de Lorentz. Postulons maintenant que la transformation va s'écrire

$$x^\mu \rightarrow \tilde{x}^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu \quad (86)$$

$$\psi_a(x) \rightarrow \tilde{\psi}_a(\tilde{x}) = S_{ab}(\Lambda)\psi_b(x). \quad (87)$$

où l'on va chercher à déterminer la forme de la matrice S . Comme on définit que les matrices γ^μ ne se transforment pas sous le groupe de Lorentz - ce sont des matrices fixées pour tous les observateurs - l'équation de Dirac devient

$$(i\gamma^\mu \tilde{D}_\mu - m)\tilde{\psi}(\tilde{x}) = S(\Lambda)[(iS^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda)\Lambda_\mu^\nu D_\nu - m)\psi(x)] = 0. \quad (88)$$

Ainsi, l'équation est covariante si la matrice S vérifie

$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda)\Lambda_\mu^\nu = \gamma^\nu, \quad (89)$$

que l'on peut écrire

$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda) = \Lambda^\mu_\nu \gamma^\nu. \quad (90)$$

On doit donc trouver une matrice $S(\Lambda)$ qui conjugue les matrices γ^μ de telle sorte qu'elles se transforment comme un vecteur. Remarquons une fois de plus que, par définition, les matrices γ^μ ne se transforment pas sous le groupe de Lorentz, mais que la matrice $S(\Lambda)$ les conjugue de telle sorte à faire apparaître $\Lambda^\mu{}_\nu$. On remarque également que comme les matrices γ^μ vérifient l'algèbre de Clifford, les matrices $\Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu$ aussi, car $\Lambda^\mu{}_\alpha \Lambda^\nu{}_\beta \eta^{\alpha\beta} = \eta^{\mu\nu}$. Il doit alors forcément exister une matrice qui relie γ^μ et $\Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu$ par le théorème d'unicité. Ceci nous assure l'existence de la matrice $S(\Lambda)$ et nous avons donc prouvé la covariance de l'équation de Dirac. On peut toutefois obtenir une forme explicite pour la matrice S . Pour la déterminer, on va paramétrer la transformation par

$$S(\Lambda) = \exp \left[-\frac{i}{2} \omega_{\mu\nu} \Sigma^{\mu\nu} \right] = \mathbb{1} - \frac{i}{2} \omega_{\mu\nu} \Sigma^{\mu\nu} + \dots \quad (91)$$

où $\omega_{\mu\nu} = -\omega_{\nu\mu}$ sont les paramètres d'une transformation de Lorentz propre. Pour que la matrice S soit non triviale, il faut que les $\Sigma^{\mu\nu}$ soient antisymétriques. On impose donc que $\Sigma^{\mu\nu} = -\Sigma^{\nu\mu}$. Au premier ordre, on peut écrire

$$S^{-1}(\Lambda) \gamma^\mu S(\Lambda) = \left(\mathbb{1} + \frac{i}{2} \omega_{\mu\nu} \Sigma^{\mu\nu} \right) \gamma^\mu \left(\mathbb{1} - \frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} \Sigma^{\alpha\beta} \right) = \gamma^\mu - \frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} [\gamma^\mu, \Sigma^{\alpha\beta}] \quad (92)$$

et

$$\Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu = \gamma^\mu + \frac{1}{2} \omega_{\alpha\beta} (\eta^{\mu\alpha} \gamma^\beta - \eta^{\mu\beta} \gamma^\alpha) \quad (93)$$

car une transformation de Lorentz propre peut s'écrire au premier ordre comme

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + \frac{1}{2} \omega_{\alpha\beta} (\eta^{\mu\alpha} \delta_\nu^\beta - \eta^{\mu\beta} \delta_\nu^\alpha). \quad (94)$$

La condition (90) implique alors que

$$[\gamma^\mu, \Sigma^{\alpha\beta}] = i (\eta^{\mu\alpha} \gamma^\beta - \eta^{\mu\beta} \gamma^\alpha). \quad (95)$$

Il est possible de montrer que la seule possibilité est que $\Sigma^{\alpha\beta} \propto [\gamma^\alpha, \gamma^\beta]$. Un calcul explicite permet de conclure que

$$\Sigma^{\alpha\beta} = \frac{i}{4} [\gamma^\alpha, \gamma^\beta]. \quad (96)$$

A partir des propriétés des matrices γ^μ , on peut démontrer que

$$S^\dagger = \gamma^0 S^{-1} \gamma^0. \quad (97)$$

En définissant un nouveau conjugué par la relation

$$\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0 = (\gamma^0 \psi)^\dagger \quad (98)$$

on en déduit facilement que comme $\tilde{\psi} = S\psi$ alors $\tilde{\bar{\psi}} = \bar{\psi}S^{-1}$. Avec ces nouvelles notations, le courant conservé prend la forme

$$J^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi \quad (99)$$

et comme $S^{-1}\gamma^\mu S = \Lambda^\mu{}_\nu\gamma^\nu$ on en déduit facilement que

$$\tilde{J}^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu J^\nu. \quad (100)$$

On peut conclure que J^μ se transforme comme un quadrivecteur sous transformation de Lorentz et que son interprétation en tant que quadri-courant est justifiée. Dans le même registre, on voit qu'une quantité du type $\bar{\psi}\psi$ est un scalaire et doit donc ne pas varier sous changement de repère. Cette observation nous sera utile lorsqu'on voudra normaliser les solutions libres de l'équation de Dirac. Notons enfin qu'il est possible d'étudier d'autres types de transformations de l'équation de Dirac, tels la parité, le renversement temporel ou encore l'invariance de jauge, ce que nous ne ferons pas ici.

2.3 Chiralité

La matrice γ^5 introduite précédemment joue un rôle spécial dans la théorie de Dirac. Cette matrice permet de construire des *projecteurs de chiralité* dans l'espace des spineurs :

$$P_\pm = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \gamma^5). \quad (101)$$

On vérifie facilement que ce sont des projecteurs en remarquant que $P_\pm^\dagger = P_\pm$, $P_\pm^2 = P_\pm$, $P_\pm P_\mp = 0$ et $P_+ + P_- = \mathbb{1}$. A partir de la forme explicite des générateurs $\Sigma^{\alpha\beta}$ on peut récupérer la forme des générateurs des boosts et des rotations appliqués aux spineurs. On trouve en effet que les générateurs sont

$$S_i = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\Sigma^{jk} = \frac{i}{4}\varepsilon_{ijk}\gamma^j\gamma^k \quad \text{boosts} \quad (102)$$

$$K^i = \Sigma^{0i} = \frac{i}{2}\gamma^0\gamma^i \quad \text{rotations} \quad (103)$$

Dans la représentation de Weyl, les projecteurs deviennent

$$P_+ = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad P_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (104)$$

et les générateurs des rotations et des boosts sont

$$S_i = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix} \quad K_i = -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & -\sigma^i \end{pmatrix}. \quad (105)$$

On remarque alors que tout est construit à partir de la représentation de spin 1/2 des générateurs de $SU(2)$, c'est à dire $\sigma^i/2$. Dans la représentation $SU(2) \times SU(2)$ introduite pour le groupe de Lorentz, les générateurs complexes sont donnés par

$$N_i^\pm = \frac{1}{2}(S_i \pm iK_i), \quad (106)$$

ce qui mène dans notre cas à

$$N_i^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad N_i^- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix}. \quad (107)$$

Les spineurs ψ sont donc clairement dans une représentation $(j_+, j_-) = (1/2, 1/2)$ du groupe de Lorentz. Comme $[\gamma^5, S] = 0$ et donc $[P_\pm, S] = 0$, cette représentation est réductible par rapport au groupe de Lorentz propre et les deux représentations qui en découlent sont alors clairement $(1/2, 0)$ et $(0, 1/2)$. On définit alors la partie à chiralité +1 comme $\psi_+ = P_+ \psi$ qui est dans la représentation $(1/2, 0)$ et la partie à chiralité -1 comme $\psi_- = P_- \psi$ qui est la représentation $(0, 1/2)$. Pour résumer, on a

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} : \text{représentation } (1/2, 0) \quad (108)$$

$$\psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} : \text{représentation } (0, 1/2) \quad (109)$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} : \text{représentation } (1/2, 0) \oplus (0, 1/2) \quad (110)$$

On voit donc que l'équation de Dirac contient naturellement deux représentations de spin 1/2. C'est un gros indice qui pousse à dire que l'équation de Dirac décrit des particules de spin 1/2. Ceci deviendra clair quand nous verrons apparaître l'énergie d'interaction d'une particule de spin 1/2 dans un champ \vec{B} lorsqu'on étudiera la limite non relativiste.

Notons enfin que, si l'opération de parité intervient, on ne peut pas se restreindre aux sous-représentations $(1/2, 0)$ et $(0, 1/2)$. En effet, l'opération de parité change la représentation de (j_+, j_-) en (j_-, j_+) , et cela n'aurait alors aucun sens de se restreindre à une des sous-représentations. Donc, seuls les spineurs à 4 composantes forment une représentation du groupe de Lorentz complet.

Remarquons finalement que, si on avait choisi la représentation standard pour faire cette analyse, nous aurions eu plus de difficultés, car il n'aurait pas été évident que la représentation dans laquelle on travaille puisse se scinder en deux sous-représentations du groupe de Lorentz propre.

2.4 Solutions libres

L'équation de Dirac étant un tant soit peu plus compliquée que celle de Klein-Gordon, la recherche des solutions de l'équation libre est un peu plus laborieuse. Il existe plusieurs méthodes pour trouver les solutions libres ; la plus répandue est certainement celle faisant le calcul dans le référentiel de la particule au repos, et un boost permet de récupérer le cas général. Nous allons opter pour une autre méthode qui est essentiellement algébrique.

On commence par écrire que

$$\psi(x, t) = u(p)e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)} = u(p)e^{-ipx}. \quad (111)$$

L'équation de Dirac libre implique alors une relation algébrique

$$(\gamma^\mu p_\mu - m)u(p) = (\not{p} - m)u(p) = 0, \quad (112)$$

où l'on a utilisé la notation de Feynman, $\not{A} = \gamma^\mu A_\mu$ pour un quadrivecteur A_μ quelconque. Nous allons maintenant séparer $u(p)$ en deux composantes bidimensionnelles. Avec u_a et u_b deux spineurs à deux composantes, on écrit

$$u(p) = \begin{pmatrix} u_a \\ u_b \end{pmatrix}. \quad (113)$$

En représentation standard, l'équation pour $u(p)$ prend alors la forme

$$(\gamma^0 E - \vec{\gamma} \cdot \vec{p})u(p) = \begin{pmatrix} E & -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_a \\ u_b \end{pmatrix} = m \begin{pmatrix} u_a \\ u_b \end{pmatrix}, \quad (114)$$

qui donne la paire de relations couplées

$$\begin{aligned} Eu_a - \vec{\sigma} \cdot \vec{p} u_b &= mu_a \\ -Eu_b + \vec{\sigma} \cdot \vec{p} u_a &= mu_b \end{aligned} \quad (115)$$

On est alors mené à résoudre

$$u_a = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E - m} u_b, \quad u_b = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E + m} u_a. \quad (116)$$

En utilisant l'identité $\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} = \vec{p}^2$, l'équation pour u_b devient

$$u_b = \frac{\vec{p}^2}{E^2 - m^2} u_b, \quad (117)$$

ce qui montre qu'il faut imposer $E^2 - m^2 = \vec{p}^2$. Comme dans le cas de Klein-Gordon, il existe deux solutions pour l'énergie, une négative et une positive

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}. \quad (118)$$

Considérons tout d'abord les solutions à énergies positives $E = E_+$. Posons $u_a = N\chi$ où χ est un spineur à deux composantes et N est un nombre complexe. La solution prend la forme

$$u(p) = N \begin{pmatrix} \chi \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E+m} \chi \end{pmatrix}. \quad (119)$$

On voit qu'il existe deux solutions linéairement indépendantes pour $u(p)$ correspondant aux deux possibilités indépendantes pour χ . Par exemple $\chi_1 = (1, 0)$ et $\chi_2 = (0, 1)$. Afin de normaliser proprement l'équation de Dirac, on se rappelle que $\bar{u}u$ est un scalaire, ce qui nous pousse à imposer

$$\bar{u}(p)u(p) = 1. \quad (120)$$

Cette contrainte se résout facilement et un choix de phase pour N nous permet d'obtenir $N = \sqrt{\frac{E+m}{2m}}$. Ainsi,

$$u(p) = \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \begin{pmatrix} \chi \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E+m} \chi \end{pmatrix}. \quad (121)$$

On a alors trouvé deux solutions à énergies positives $u_1(p)$ et $u_2(p)$ qui sont linéairement indépendantes, normalisées et orthogonales, c'est à dire $\bar{u}_1 u_1 = \bar{u}_2 u_2 = 1$ et $\bar{u}_1 u_2 = \bar{u}_2 u_1 = 0$.

Considérons maintenant les deux solutions linéairement indépendantes à énergies négatives. L'énergie ayant le signe opposé, on va construire ces spineurs avec le signe de \vec{p} opposé. On prend comme ansatz

$$\psi(x, t) = v(p)e^{i(-\vec{p} \cdot \vec{x} + Et)} = v(p)e^{ipx}. \quad (122)$$

Comme avant, l'équation de Dirac devient algébrique

$$(\not{p} + m)v(p) = 0. \quad (123)$$

En écrivant $v = (v_a, v_b)$ on doit résoudre le système

$$\begin{aligned} -Ev_a + \vec{\sigma} \cdot \vec{p} v_b &= m v_a \\ Ev_b - \vec{\sigma} \cdot \vec{p} v_a &= m v_b \end{aligned} \quad (124)$$

ce qui revient à

$$v_a = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E+m} v_b, \quad v_b = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E-m} v_a. \quad (125)$$

En prenant $v_b = N\theta$, on a

$$v(p) = N \left(\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E+m} \theta \right). \quad (126)$$

De plus,

$$\bar{v}(p)v(p) = -|N|^2 \frac{2m}{E+m} \quad (127)$$

on va donc normaliser à

$$\bar{v}(p)v(p) = -1 \quad (128)$$

et on retrouve comme avant $N = \sqrt{\frac{E+m}{2m}}$. Finalement, le spineur s'écrit

$$v(p) = \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \left(\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E+m} \theta \right) \quad (129)$$

et on peut prendre $\theta_1 = (1, 0)$ et $\theta_2 = (0, 1)$ pour avoir deux spineurs indépendants à énergies négatives. On retrouve les mêmes propriétés qu'avant, c'est à dire $\bar{v}_1 v_1 = \bar{v}_2 v_2 = 1$ et $\bar{v}_1 v_2 = \bar{v}_2 v_1 = 0$. Notons aussi que les solutions à énergies positives et négatives sont orthogonales : $\bar{u}(p)v(p) = \bar{v}(p)u(p) = 0$.

On peut alors résumer nos relations par

$$\begin{aligned} (\not{p} - m)u(p) &= 0 & \bar{u}(p)u(p) &= 1 \\ (\not{p} + m)v(p) &= 0 & \bar{v}(p)v(p) &= -1 \end{aligned} \quad (130)$$

avec la condition d'orthogonalité

$$\bar{u}(p)v(p) = \bar{v}(p)u(p) = 0. \quad (131)$$

Il est parfois également utile de connaître l'équation de Dirac pour les spineurs conjugués de u et v . On arrive sans trop de peine à voir que les équations correspondantes sont

$$\bar{u}(p)(\not{p} - m) = 0 \quad \bar{v}(p)(\not{p} + m) = 0. \quad (132)$$

La solution générale libre de l'équation de Dirac peut être écrite par linéarité sous forme d'une intégrale sur p des spineurs u et v . Avec $a_s(\vec{p})$ et $b_s(\vec{p})$ deux fonctions, on peut écrire que

$$\psi(x, t) = \sum_{s=1,2} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left(a_s(\vec{p}) u_s(p) e^{-i p x} + b_s(\vec{p}) v_s(p) e^{i p x} \right). \quad (133)$$

Le champ ψ , écrit en transformée de Fourier, a alors clairement 4 degrés de liberté, deux à énergies positives et deux à énergies négatives.

Nous allons encore démontrer une identité qui sera utile par la suite. En notant $s, t = 1, 2$, comme $\bar{u}_s(p)(\not{p} - m) = 0$, on doit avoir $p_\mu \bar{u}_s(p) \gamma^\mu u_t(p) = m \delta_{st}$. Mais $p_\mu p^\mu = m^2$, il vient alors

$$\bar{u}_s(p) \gamma^\mu u_t(p) = \frac{p^\mu}{m} \delta_{st} \quad (134)$$

et on a de même

$$\bar{v}_s(p) \gamma^\mu v_t(p) = \frac{p^\mu}{m} \delta_{st}. \quad (135)$$

Ces deux dernières égalités sont des cas particuliers d'identités plus générales appelées identités de Gordon.

2.5 Limite non relativiste

Il est possible de définir une limite non relativiste de l'équation de Dirac, comme nous l'avons fait pour Klein-Gordon. Dans ce cas, il existe également deux méthodes pour y arriver, dont celle de Foldy-Wouthuysen. Nous choisissons l'autre méthode qui consiste à développer la formulation Hamiltonienne jusqu'à l'ordre $1/m^3$.

On commence par remarquer que l'on peut mettre l'équation de Dirac (85) sous forme Hamiltonienne $i \partial_t \psi_D = H \psi_D(x)$ avec ψ_D un spineur à 4 composantes et

$$H = m \gamma^0 + \gamma^0 \vec{\Pi} \cdot \vec{\gamma} + q A_0 \mathbb{1}. \quad (136)$$

où $\vec{\Pi} = \vec{p} - q \vec{A}$. Comme pour le cas de Klein-Gordon, on spécifie la limite non relativiste en disant que les champs sont faibles par rapport à la masse et que la variation spatiale des quantités est faible. On va également chercher des états stationnaires sous la forme

$$\psi_D(x, t) = e^{-iEt} \psi(x), \quad \psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \quad (137)$$

avec ψ_1 et ψ_2 deux spineurs à deux composantes et l'énergie $E = m + \varepsilon$, $\varepsilon \ll m$. On peut ainsi résumer nos hypothèses par $\varepsilon \ll m$, $|A_0| \ll m$, $|\vec{A}| \ll m$ et $|\vec{p}| \ll m$ où les inconnues du problème deviennent ψ_1 , ψ_2 et ε . En choisissant la représentation standard pour les matrices γ^μ , l'équation $H \psi = E \psi$ donne

$$(m + \varepsilon) \psi_1 = (m + q A_0) \psi_1 + \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \psi_2 \quad (138)$$

$$(m + \varepsilon) \psi_2 = -(m - q A_0) \psi_2 + \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \psi_1 \quad (139)$$

On peut alors développer ces relations en considérant les opérateurs comme des nombres, et (139) donne

$$\psi_2 = \frac{1}{2m} \left(1 + \frac{q A_0}{2m} - \frac{\varepsilon}{2m} \right) \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \psi_1. \quad (140)$$

En remplaçant dans l'équation (138), on arrive à

$$\varepsilon\psi_1 = \left(\frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2}{2m} + \frac{1}{4m^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} (qA_0 - \varepsilon) \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} + qA_0 \right) \psi_1 \quad (141)$$

Il y a cette fois-ci également une subtilité liée à la normalisation. On souhaite imposer que la densité de probabilité $\rho = \psi_D^\dagger \psi_D = \psi^\dagger \psi$ soit telle que $\int \rho d^3x = 1$. Mais comme $\psi_2 \simeq \frac{1}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \psi_1$, on doit avoir

$$\int \psi_1^\dagger \left(1 + \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2}{4m^2} \right) \psi_1 d^3x. \quad (142)$$

On définit alors

$$\chi = \left(1 + \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2}{8m^2} \right) \psi_1 \quad \Leftrightarrow \quad \psi_1 = \left(1 - \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2}{8m^2} \right) \chi \quad (143)$$

où l'équivalence est vraie à l'ordre $1/m^3$. De cette manière, on a $\int \chi^\dagger \chi d^3x = 1$. La bonne fonction à utiliser est donc χ . En remplaçant dans (141) et après quelques manipulations, on trouve

$$\varepsilon\chi = \left(\frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2}{2m} - \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^4}{8m^3} + qA_0 - \frac{qA_0(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2}{8m^2} + \frac{1}{4m^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} qA_0 \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} - \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2 qA_0}{8m^2} \right) \chi. \quad (144)$$

On peut écrire cette dernière relation avec un double commutateur. Elle prend alors la forme

$$\varepsilon\chi = \left(\frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2}{2m} - \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^4}{8m^3} + qA_0 - \frac{1}{8m^2} \left[\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi}, \left[\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi}, qA_0 \right] \right] \right) \chi. \quad (145)$$

Pour rendre cette expression plus limpide, on va faire l'hypothèse que les champs ne dépendent pas du temps. En utilisant : $\vec{\sigma} \cdot \vec{a} \vec{\sigma} \cdot \vec{b} = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\vec{\sigma} \cdot \vec{a} \wedge \vec{b}$ pour deux vecteurs \vec{a} et \vec{b} quelconques, $\vec{\Pi} = \vec{p} - q\vec{A}$, $[p_i, f(\vec{x})] = -i\partial_i f(\vec{x})$ pour une fonction f quelconque, $\vec{E} = -\vec{\nabla}A_0$ car \vec{A} ne dépend pas du temps, et $\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = -\partial_t \vec{B} = 0$ par l'équation de Maxwell et le fait qu'il n'y ait pas de dépendance temporelle, un calcul long et minutieux permet d'écrire $H\chi = \varepsilon\chi$ avec

$$H = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2}{2m} - \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^4}{8m^3} + qA_0 - \frac{q}{8m^2} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{E} + 2\vec{\sigma} \cdot (\vec{E} \wedge \vec{\Pi}) \right). \quad (146)$$

En pensant au fait que $\vec{\nabla} \wedge \vec{A} = \vec{B}$, on montre sans trop de difficultés que $(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2 = \vec{\Pi}^2 - q\vec{\sigma} \cdot \vec{B}$. En se rappelant que \vec{B} est petit et que χ et \vec{B} varient lentement, le Hamiltonien prend finalement la forme

$$H = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} - \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^4}{8m^3} - \frac{q}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + qA_0 - \frac{q}{8m^2} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{E} + 2\vec{\sigma} \cdot (\vec{E} \wedge \vec{\Pi}) \right). \quad (147)$$

Le premier terme est l'énergie cinétique non relativiste et le deuxième est la première correction relativiste. On identifie ensuite l'énergie d'interaction d'un spin 1/2 (rapport gyromagnétique $g=2$) avec un champ externe. On en déduit que la théorie de Dirac décrit des particules de spin 1/2 et implique que $g = 2$. Vient ensuite l'énergie potentielle d'une charge q dans un potentiel A_0 . Le terme

$$-\frac{q}{8m^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} \quad (148)$$

est appelé terme de Darwin et provient du Zitterbewegung de la particule que l'on étudiera plus loin. En effet, la variation du potentiel A_0 au deuxième ordre est

$$\Delta A_0 = A_0(x + \delta x) - A_0(x) \simeq \partial_i A_0(x) \langle \delta x_i \rangle + \frac{1}{2} \partial_i \partial_j A_0(x) \langle \delta x_i \delta x_j \rangle. \quad (149)$$

De plus, le Zitterbewegung est tel que $\delta x \sim 1/m$ et, en supposant que $\langle \delta x_i \rangle = 0$ mais $\langle \delta x_i \delta x_j \rangle = \frac{1}{3m^2} \delta_{ij}$ par isotropie, on trouve

$$\Delta A_0 = -\frac{q}{6m^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} \quad (150)$$

A part le facteur 1/6 qui devrait être 1/8, on retrouve clairement le terme cherché. A cause de son identification au Zitterbewegung, le terme de Darwin n'a pas d'analogie classique.

Si l'on suppose que $\vec{A} = 0$, il reste à discuter la partie

$$-\frac{q}{4m^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{E} \wedge \vec{p}. \quad (151)$$

En supposant de plus que $A_0 = A_0(r)$, $\vec{E} = -\frac{dA_0}{dr} \cdot \frac{\vec{r}}{r}$, et avec $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$, ce dernier terme devient

$$\frac{q}{4m^2} \frac{1}{r} \frac{dA_0}{dr} \vec{\sigma} \cdot \vec{L}. \quad (152)$$

On retrouve simplement le terme de spin-orbite qui apparaît ici aussi comme un effet relativiste. Il est possible de retrouver cette forme de l'interaction de manière exacte en se rappelant que dans le référentiel de la particule un champ magnétique existe (car il faut faire un boost), bien que $\vec{A} = 0$ dans le référentiel au repos. On peut ensuite calculer l'énergie d'interaction de la particule avec le champ en prenant garde au fait qu'un effet lié à la rotation du référentiel propre (précession de Thomas) induit une correction à cette énergie. Pour de plus amples informations, la discussion détaillée de la précession de Thomas est traitée dans [4] et sa répercussion à travers le terme de spin-orbite est calculée dans [1].

2.6 Atome d'hydrogène

Le spectre de l'atome d'hydrogène est un problème bien connu de la mécanique quantique non relativiste. Comme nous avons écrit un Hamiltonien effectif à la limite non relativiste de la théorie de Dirac, il est possible de calculer les changements que cela implique sur le spectre de l'atome d'hydrogène.

On pose un champ magnétique nul, i.e. $\vec{A} = 0$, et un potentiel Coulombien : $qA_0 = -\frac{\alpha}{r}$ avec $\alpha = 1/137$. En utilisant (152) et en définissant l'opérateur de spin par $\vec{S} = \vec{\sigma}/2$, le Hamiltonien peut s'écrire

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\alpha}{r}}_{H_0} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3} - \frac{q}{8m^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} + \frac{1}{2m^2} \frac{\alpha}{r^3} \vec{S} \cdot \vec{L}. \quad (153)$$

Le spectre de H_0 est connu, c'est celui de l'atome d'hydrogène et on traite les autres termes en perturbation. Si l'on considère l'état ψ_{nl} et que l'on note $\langle \cdot \rangle$ la moyenne sur cet état, le calcul que l'on avait fait dans le cas de Klein-Gordon peut être repris, et on a

$$\langle \Delta E \rangle_{p^4}^{nl} = - \left\langle \frac{\vec{p}^4}{8m^3} \right\rangle = - \frac{m\alpha^4}{2n^3} \left(\frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right). \quad (154)$$

En sachant que $\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r})$, le terme de Darwin donne la contribution

$$\begin{aligned} \langle \Delta E \rangle_{\text{Darw}}^{nl} &= - \frac{q}{8m^2} \langle \vec{\nabla} \cdot \vec{E} \rangle = \frac{4\pi\alpha}{8m^2} \langle \delta(\vec{r}) \rangle \\ &= \frac{\pi\alpha}{2m^2} \delta_{l0} |\psi_{n0}(0)|^2 = \frac{\pi\alpha}{2m^2} \delta_{l0} \frac{m^3 \alpha^3}{\pi n^3} \\ &= \frac{m\alpha^4}{2n^3} \delta_{l0}. \end{aligned} \quad (155)$$

Pour calculer la contribution du spin-orbite, on va considérer l'opérateur de moment angulaire total

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (156)$$

qui peut prendre la valeur $j = l + 1/2$ ou $j = l - 1/2$. En remarquant que $2\vec{S} \cdot \vec{L} = \vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2$, on a

$$\langle \Delta E \rangle_{so}^{nl} = \frac{\alpha}{4m^2} \langle r^{-3} \rangle (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2). \quad (157)$$

Mais comme

$$\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 = \begin{cases} l & \text{si } j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & \text{si } j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad \text{et} \quad \langle r^{-3} \rangle = \frac{\alpha^3 m^3}{n^3 l(l+1)(l + \frac{1}{2})} \quad (158)$$

il vient

$$(\Delta E)_{so}^{nl} = \frac{m\alpha^4}{2n^3(2l+1)} \times \begin{cases} (l+1)^{-1} & \text{si } j = l + \frac{1}{2} \\ -l^{-1} & \text{si } j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (159)$$

Le spectre de H_0 étant $E_{nl} = -\frac{m\alpha^2}{2n^2}$, on peut finalement combiner tous les termes pour trouver que le spectre des énergies ε_{nl} de H est

$$\varepsilon_{nl} = -\frac{m\alpha^2}{2n^2} \left(1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right) \quad (160)$$

On observe alors que l'énergie dépend seulement de j et est indépendante de l . On remarque aussi que le shift ε_{nl} par rapport à l'énergie de masse a la même forme que le shift du cas de Klein-Gordon, équation (40), mais avec le remplacement de $l + \frac{1}{2}$ par $j + \frac{1}{2}$. Cette différence paraît petite, mais elle est facilement mesurable et des expériences sur l'atome d'hydrogène imposent que l'électron *doit* avoir spin 1/2.

Il est également possible de trouver une solution exacte à ce problème de l'atome d'hydrogène, comme il fut le cas avec les atomes mésoniques de l'équation de Klein-Gordon. Dans [1] ou encore [6], il est démontré que

$$E_{n,j} = m \left(1 + \frac{\alpha^2}{\left(n + s - \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 \right)} \right)^{-1/2}. \quad (161)$$

On peut, dans ce cas également, utiliser le théorème du viriel pour voir que le paramètre d'expansion doit être α^2 et un développement limité permet de retrouver immédiatement la solution perturbative. La levée de dégénérescence par rapport à l'atome d'hydrogène, symbolisée par l'apparition de j dans la formule pour $E_{n,j}$, s'appelle la structure fine de l'atome d'hydrogène. On remarque qu'il y a toujours une dégénérescence en j , étant donné que $l + 1/2 = (l + 1) - 1/2$.

2.7 Lamb shift

La solution exacte (161) pour l'atome d'hydrogène devrait être en accord avec l'expérience, étant donné que les effets relativistes ont été pris en compte. Il se trouve que la dégénérescence en j que prédit l'équation de Dirac n'est pas observée, car il existe un shift entre les états $2S_{1/2}$ et $2P_{1/2}$. Cet effet peut se comprendre car on a traité le champ électromagnétique comme un champ classique et non comme un champ quantique composé de photons. Pour un traitement rigoureux, il faudrait quantifier le champ et traiter le problème dans le cadre de la théorie quantique des champs.

Malgré cela, il est possible, par des arguments heuristiques, d'obtenir une formule reproduisant ce shift, le *Lamb shift*. Pour cela, considérons un

atome d'hydrogène sans présence de photons. Le vecteur d'état est alors

$$|\psi_{nl}\rangle|0\rangle \quad (162)$$

où $|0\rangle$ signifie qu'il y a 0 photon présent, i.e. que le champ électromagnétique est dans son ground state. Si l'on quantifiait le champ, on trouverait que son énergie serait

$$\left\langle 0 \left| \frac{1}{2} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) \right| 0 \right\rangle = \sum_{\text{modes}} \frac{1}{2} \omega_k = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \omega_k = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \omega^3 d\omega \quad (163)$$

où l'on a utilisé le fait que $\omega_k = k$ pour un photon. Cette quantité diverge, comme c'est toujours le cas pour l'énergie du vide en théorie quantique des champs. Gardons toutefois cette quantité car nous ferons un cut off par la suite. Comme pour un champ de radiations on a $\vec{E}^2 = \vec{B}^2$, on trouve que

$$\langle 0 | E^2 | 0 \rangle = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \omega^3 d\omega. \quad (164)$$

On observe que la fluctuation du champ est non nulle. Cette fluctuation va alors faire bouger l'électron qui va suivre le champ. Ainsi, son énergie potentielle sera affectée. Son énergie cinétique sera aussi affectée, mais on va ignorer cet effet.

Pour les très hautes fréquences des fluctuations du champ, on va ignorer l'énergie de liaison et traiter l'électron classiquement. Soit $\Delta\vec{r}$ le déplacement de l'électron de son orbite d'équilibre. Alors,

$$m \frac{d^2}{dt^2} \Delta\vec{r} = q\vec{E}. \quad (165)$$

En passant dans l'espace de Fourier, on peut écrire que

$$\Delta x(t) = \int_{\mathbb{R}} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \Delta x(\omega) \quad \text{et} \quad E_x(t) = \int_{\mathbb{R}} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} E_x(\omega) \quad (166)$$

avec $E_x(\omega) = E_x^*(-\omega)$ et $\Delta x(\omega) = \Delta x^*(-\omega)$ car ces deux quantités sont réelles. L'équation du mouvement implique

$$\Delta x(\omega) = -\frac{q}{m\omega^2} E_x(\omega). \quad (167)$$

Considérons maintenant la valeur moyenne de $(\Delta x)^2$ sur un long temps T

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt \Delta x(t) \Delta x^*(t) \simeq \frac{1}{T} \int_{\mathbb{R}} \frac{d\omega}{2\pi} \Delta x(\omega) \Delta x^*(\omega) \quad (168)$$

car on est passé dans l'espace de Fourier et on a approximé $\int_{-T/2}^{T/2} dt \exp[i(\tilde{\omega} - \omega)t]$ par $2\pi\delta(\tilde{\omega} - \omega)$. On a alors

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{1}{T} \frac{q^2}{m^2} \int_{\mathbb{R}} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\omega^4} E_x(\omega) E_x^*(\omega). \quad (169)$$

En identifiant moyenne temporelle et moyenne quantique pour \vec{E}^2 , il vient

$$\langle E_x^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle \vec{E}^2 \rangle \simeq \frac{1}{T} \int_{\mathbb{R}} \frac{d\omega}{2\pi} E_x(\omega) E_x^*(\omega) = \frac{2}{T} \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} E_x(\omega) E_x^*(\omega) = \frac{1}{6\pi^2} \int_0^\infty \omega^3 d\omega \quad (170)$$

ce que l'on va représenter au travers de

$$\frac{1}{T} E_x(\omega) E_x^*(\omega) = \frac{1}{6\pi} \omega^3. \quad (171)$$

Puisque $\alpha = e^2/4\pi$, on a

$$\langle (\Delta \vec{r})^2 \rangle = 3 \langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{2\alpha}{\pi m^2} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega}. \quad (172)$$

Il est maintenant temps de faire un cut off pour rendre cette dernière intégrale convergente. On s'attend à ce que l'électron ne puisse pas répondre à des fréquences plus basses que l'énergie de liaison atomique. On prend ainsi

$$\omega_{\min} \sim E_{\text{Rydberg}} = \frac{\alpha^2 m}{2}. \quad (173)$$

Etant donné que nous n'avons pas considéré les effets relativistes, on doit également s'attendre à un cut off pour les hautes fréquences :

$$\omega_{\max} \sim m. \quad (174)$$

Finalement, la fluctuation devient

$$\langle (\Delta \vec{r})^2 \rangle = \frac{2\alpha}{\pi m^2} \ln \frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}}. \quad (175)$$

L'effet moyen de cette fluctuation sur l'énergie potentielle s'écrit

$$\Delta E = \langle q \Delta A_0 \rangle. \quad (176)$$

Comme on suppose que $\langle \Delta \vec{r} \rangle = 0$ et que $\langle \Delta r_i \Delta r_j \rangle = \frac{1}{3} \delta_{ij} \langle (\Delta \vec{r})^2 \rangle$, le développement fait lors de l'étude de la limite non relativiste, équation (149), nous permet d'écrire

$$\Delta E = \frac{1}{6} \langle (\Delta \vec{r})^2 \rangle \langle q \nabla^2 A_0 \rangle. \quad (177)$$

Etant donné que $q A_0 = -\frac{\alpha}{r}$ et que $\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\vec{r})$,

$$\Delta E = \frac{1}{6} 4\pi \alpha \langle (\Delta \vec{r})^2 \rangle \langle \delta(\vec{r}) \rangle. \quad (178)$$

Cette expression devant être regardée comme une perturbation dans le Hamiltonien de l'atome, la moyenne de la fonction delta doit être prise sur un

état propre ψ_{nl} de l'atome d'hydrogène, ce qui donne

$$\begin{aligned}
 \Delta E &= \frac{4\pi\alpha}{6} \langle (\Delta\vec{r})^2 \rangle |\psi(0)|^2 \\
 &= \frac{4\alpha^2}{3m^2} |\psi(0)|^2 \ln \frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}} \\
 &= \frac{4m\alpha^5}{3\pi} \ln \frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}} \times \begin{cases} \frac{1}{n^3} & \text{pour les états S} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (179)
 \end{aligned}$$

On peut faire une estimation numérique par

$$\Delta E_{2S_{1/2}-2P_{1/2}} = m \frac{\alpha^5}{6\pi} \ln \frac{2}{\alpha^2} \simeq 1.6 \times 10^9 \text{ Hz.} \quad (180)$$

Le résultat que nous venons de trouver a le bon signe et le bon ordre de grandeur! En effet, la première valeur mesurée par Lamb et Retherford était

$$\Delta E_{2S_{1/2}-2P_{1/2}} = 1057.8 \pm 0.1 \text{ MHz.} \quad (181)$$

En quantifiant le champ électromagnétique, il n'est pas trop difficile d'obtenir un résultat en meilleur accord que celui que nous avons trouvé. Un calcul sophistiqué de théorie quantique des champs du Lamb shift par Feynman, Schwinger et Tomanaga a trouvé un résultat en accord précis avec les valeurs mesurées, ce qui leur valut un prix Nobel.

Finalement, mentionnons tout de même qu'il existe encore un effet que nous n'avons pas pris en compte lors de l'étude du spectre de l'atome d'hydrogène. En plus des corrections relativistes (structure fine) et des effets quantiques du champ électromagnétique (Lamb shift), il faudrait tenir compte de l'interaction du moment magnétique de l'électron avec le spin du proton (structure hyperfine). Comme il n'y a conceptuellement aucun élément nouveau apparaissant dans l'étude de la structure hyperfine, nous ne traiterons pas cet effet dans ce document.

2.8 Zitterbewegung

L'effet de tremblement de la trajectoire, le Zitterbewegung, que nous avons mis en avant dans l'étude de l'équation de Klein-Gordon, existe aussi pour les particules de spin 1/2 décrites par l'équation de Dirac. Nous allons, cette fois-ci également, nous attarder un peu sur cet effet.

Lors de l'étude du Zitterbewegung qu'impliquait l'équation de Klein-Gordon, nous nous étions concentrés sur une preuve faisant intervenir la vision de Heisenberg (les opérateurs évoluent). Il est bien évidemment possible de refaire le même type de calculs dans le cas de Dirac et de trouver

une expression explicite pour l'opérateur position. Dans ce cas, on trouverait (voir [1] ou [7])

$$\vec{x}(t) = \vec{x}_0 + \frac{\vec{p}t}{H} - \left(\gamma^0 \vec{\gamma} - \frac{\vec{p}}{H} \right) \frac{e^{-2iHt} - 1}{2iH} \quad (182)$$

où le Hamiltonien est la version libre de (136), i.e.

$$H = m\gamma^0 + \gamma^0 \vec{p} \cdot \vec{\gamma}. \quad (183)$$

On remarque que cette forme de l'opérateur position est exactement la même que celle qui avait été obtenue à l'équation (54) pour le cas de Klein-Gordon. On identifie cette fois aussi une partie de translation à vitesse constante ainsi qu'une partie oscillante, le Zitterbewegung.

Nous aimerions compléter la discussion par une étude plus précise que ce qui avait été fait avec l'équation de Klein-Gordon pour la moyenne de l'opérateur position dans la vision de Schrödinger. Considérons un paquet d'ondes libre du type (133) où nous modifions la définition des préfacteurs des exponentielles

$$\psi(x, t) = \sum_s \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left(c_s(\vec{p}) \sqrt{\frac{m}{E_p}} u_s(\vec{p}) e^{-ipx} + d_s(\vec{p}) \sqrt{\frac{m}{E_p}} v_s(\vec{p}) e^{ipx} \right). \quad (184)$$

En utilisant les propriétés des spineurs u et v dont nous avons parlé à la section 2.4, en particulier les équations (134) et (135), on a

$$\begin{aligned} \langle \gamma^0 \vec{\gamma} \rangle &= \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x}, t) \gamma^0 \vec{\gamma} \psi(\vec{x}, t) \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \sum_{s,t} \left(|c_s(\vec{p})|^2 \delta_{st} \frac{\vec{p}}{E_p} + |d_s(\vec{p})|^2 \delta_{st} \frac{\vec{p}}{E_p} \right. \\ &\quad + d_t^*(\vec{p}) c_s(\vec{p}) \frac{m}{E_p} v_t^\dagger(\vec{p}) \gamma^0 \vec{\gamma} u_s(\vec{p}) e^{-2iE_p t} \\ &\quad \left. + c_s^*(\vec{p}) d_t(\vec{p}) \frac{m}{E_p} u_s^\dagger(\vec{p}) \gamma^0 \vec{\gamma} v_t(\vec{p}) e^{2iE_p t} \right). \end{aligned} \quad (185)$$

Mais comme

$$\frac{d}{dt} \vec{x} = i [H, \vec{x}] = \gamma^0 \vec{\gamma} \quad (186)$$

on peut intégrer l'expression de $\langle \gamma^0 \vec{\gamma} \rangle$ et on trouve

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}(t) \rangle &= \langle \vec{x}_0 \rangle + \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \sum_s \left(\frac{\vec{p}t}{E_p} (|c_s(\vec{p})|^2 + |d_s(\vec{p})|^2) \right. \\ &\quad + \sum_t \left(d_t^*(\vec{p}) c_s(\vec{p}) \frac{im}{2E_p^2} (e^{-2iE_p t} - 1) \bar{v}_t(\vec{p}) \vec{\gamma} u_s(\vec{p}) \right. \\ &\quad \left. \left. - c_s^*(\vec{p}) d_t(\vec{p}) \frac{im}{2E_p^2} (e^{2iE_p t} - 1) \bar{u}_s(\vec{p}) \vec{\gamma} v_t(\vec{p}) \right) \right) \end{aligned} \quad (187)$$

On retrouve, encore une fois, un mouvement à vitesse uniforme du paquet accompagné d'une oscillation rapide à une fréquence $\omega \sim 2m$. On voit également que l'amplitude du mouvement oscillatoire est telle que $\delta x \sim 1/m$ et que le Zitterbewegung est dû aux interférences entre la partie à énergies positives et la partie à énergies négatives.

2.9 Antiparticules

Comme nous l'avons déjà fait, on va prendre un exemple concret qui permet de se rendre compte que la théorie contient intrinsèquement plusieurs particules.

Soit une particule de masse m et énergie $E = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$ incidente sur une marche de potentiel

$$V(x) = V_0 \theta(x) = q A_0(x). \quad (188)$$

On suppose que le paquet d'ondes incident est composé d'énergies positives uniquement. La solution au problème prend la forme

$$\psi(x) = \begin{cases} \sum_{\alpha} A_{\alpha} u_{\alpha}(p) e^{i p x} + \sum_{\beta} B_{\beta} u_{\beta}(-p) e^{-i p x} & \text{si } x < 0 \quad k = \sqrt{E^2 - m^2} \\ \sum_{\lambda} C_{\lambda} u_{\lambda}(q) e^{i q x} & \text{si } x > 0 \quad q = \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2} \end{cases} \quad (189)$$

Il faut imposer la continuité de la fonction d'onde en $x = 0$. La dérivée de la fonction n'entre pas en jeu, étant donné que l'équation de Dirac est du premier degré et que le courant de probabilité ne dépend pas des dérivées de la fonction d'onde. En utilisant la forme explicite des spineurs u_{α} , l'analyse, composante par composante, nous impose de résoudre le système

$$\begin{aligned} A_{\alpha} + B_{\alpha} &= \sqrt{\frac{E - V_0 + m}{E + m}} C_{\alpha} \\ A_{\alpha} - B_{\alpha} &= \frac{q}{p} \frac{E + m}{E - V_0 + m} \sqrt{\frac{E - V_0 + m}{E + m}} C_{\alpha}. \end{aligned} \quad (190)$$

On peut résoudre ce système et les coefficients de transmission et réflexion T et R s'écrivent

$$R = \left| \frac{B_{\alpha}}{A_{\alpha}} \right|^2 = \left| \frac{1 - r}{1 + r} \right|^2 \quad (191)$$

$$T = \frac{q}{p} \left| \frac{C_{\alpha}}{A_{\alpha}} \right|^2 = \frac{4r}{|1 + r|^2} \quad (192)$$

avec

$$r = \frac{q}{p} \frac{E + m}{E - V_0 + m} = \sqrt{\frac{E + m}{E - V_0 + m}} \sqrt{\frac{E - V_0 - m}{E - m}}. \quad (193)$$

Il y a alors 3 cas à examiner :

1. $0 \leq V_0 \leq E - m$: L'énergie cinétique est plus grande que la barrière. Dans ce cas q est réel et positif et on a $r = |r|$.

$$T = \frac{4|r|}{(1+|r|)^2} \in [0, 1], \quad R = \left(\frac{1-|r|}{1+|r|}\right)^2 \in [0, 1] \quad R + T = 1. \quad (194)$$

L'onde incidente est partiellement réfléchiée et partiellement transmise, comme en mécanique quantique non relativiste.

2. $E - m \leq V_0 \leq E + m$: Dans ce cas, q devient imaginaire et on a $r = i|r|$. De plus,

$$T = 0, \quad R = 1, \quad R + T = 1. \quad (195)$$

L'onde incidente est totalement réfléchiée, ce qui est analogue au cas non relativiste.

3. $E + m \leq V_0$: Dans ce cas, q redevient réel, mais il faut le choisir *néglatif* pour que $R + T = 1$, et alors $r = -|r|$. Et,

$$R = \left(\frac{1+|r|}{1-|r|}\right)^2 > 1, \quad T = -\frac{4|r|}{(1-|r|)^2} < 0. \quad (196)$$

La probabilité est toujours conservée, mais ceci nous coûte un coefficient de transmission négatif et un coefficient de réflexion plus grand que 1.

Exactement comme dans le cas de Klein-Gordon, l'interprétation de ces résultats est que des paires de solutions à énergies positives et négatives se déplaçant vers la gauche et vers la droite s'additionnent et se soustraient aux ondes réfléchies par la barrière. On interprète alors la composante à énergies positives comme une particule de charge q , tandis que la composante à énergies négatives est interprétée comme une particule de charge $-q$. Cette paire de particule-antiparticule contribue de manière opposée à R et T et ceci explique que l'on trouve $R > 1$ et $T < 0$. Il faut donc se résoudre au fait que l'interprétation de la fonction d'onde ψ comme une densité à une particule mène forcément à des complications, étant donné que nous sommes confrontés à un problème à plusieurs particules.

On pourrait aussi formaliser cet exemple de façon générale en considérant la relation entre les solutions à énergies positives (particules) et négatives (antiparticules) en présence de champ externe dans une procédure appelée conjugaison de charge. Nous ne le ferons pas ici et renvoyons le lecteur à [2], par exemple. Mentionnons finalement que la seule manière de traiter proprement ce problème se fait via le formalisme de la théorie quantique des champs.

3 Annexe

3.1 Théorème du viriel

Soit \hat{H} le Hamiltonien d'un système. On note $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ l'opérateur d'énergie cinétique et $V(\hat{x})$ le potentiel en fonction de la position. On utilisera la notation $|\phi_n\rangle$ pour désigner un état propre d'énergie E_n du Hamiltonien, i.e tel que $\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$. Énonçons deux lemmes utiles.

Lemme 1. *La moyenne du commutateur $[\hat{H}, \hat{p}\hat{x}]$ prise sur un état propre du Hamiltonien est nulle.*

Démonstration.

$$\langle \phi_n | [\hat{H}, \hat{p}\hat{x}] | \phi_n \rangle = \langle \phi_n | \hat{H} \hat{p}\hat{x} | \phi_n \rangle - \langle \phi_n | \hat{p}\hat{x} \hat{H} | \phi_n \rangle = E_n \langle \phi_n | \hat{p}\hat{x} | \phi_n \rangle - \langle \phi_n | \hat{p}\hat{x} | \phi_n \rangle E_n.$$

car \hat{H} est un opérateur hermitien et agit indifféremment à gauche ou à droite. Donc on trouve bien que $\langle \phi_n | [\hat{H}, \hat{p}\hat{x}] | \phi_n \rangle = 0$. □

Lemme 2. *Si la moyenne du commutateur $[\hat{H}, \hat{p}\hat{x}]$ sur l'état $|\phi\rangle$ est nulle, et si le potentiel est une fonction homogène de degré k , alors*

$$k\langle V \rangle = 2\langle T \rangle$$

où les moyennes sont prises sur l'état $|\phi\rangle$.

Démonstration. Calculons le commutateur $[\hat{H}, \hat{p}\hat{x}]$.

$$[\hat{H}, \hat{p}\hat{x}] = [\hat{H}, \hat{p}]\hat{x} + \hat{p}[\hat{H}, \hat{x}]$$

Le Hamiltonien \hat{H} s'écrit $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$. Ainsi,

$$[\hat{H}, \hat{p}] = [V(\hat{x}), \hat{p}] = iV'(\hat{x}).$$

De même, l'autre commutateur est

$$[\hat{H}, \hat{x}] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x} \right] = -\frac{i}{m}\hat{p}.$$

On peut ainsi écrire que $[\hat{H}, \hat{p}\hat{x}] = i\hat{x}V'(\hat{x}) - i\frac{\hat{p}^2}{m}$.

On en conclut que $\langle \hat{x}V'(\hat{x}) \rangle = \langle \frac{\hat{p}^2}{m} \rangle = 2\langle T \rangle$ sur l'état $|\phi\rangle$. Nous avons supposé que le potentiel est une fonction homogène de degré k , i.e. $V(\alpha x) = \alpha^k V(x)$. Le théorème d'Euler donne que $xV'(x) = kV(x)$. Finalement, on a que

$$k\langle V \rangle = 2\langle T \rangle.$$

□

Remarquons que, dans ce dernier lemme, il n'est pas requis de travailler sur un état propre du Hamiltonien, mais juste un sur état qui annule $[\hat{H}, \hat{p}\hat{x}]$ en moyenne. Combinons ces deux lemmes pour obtenir le théorème du viriel tel qu'il est usuellement énoncé.

Théorème 1. (*Viriel*) *Si l'on calcule les moyennes sur un état propre du Hamiltonien, et si le potentiel est une fonction homogène de degré k , alors*

$$k\langle V \rangle = 2\langle T \rangle.$$

Démonstration. La preuve est triviale en utilisant les lemmes 1 et 2. \square

Dans le cas d'un potentiel Coulombien, on a $V(\vec{r}) \propto 1/|r|$ et donc $k = -1$. Pour ce type de potentiel, le théorème du viriel donne

$$\langle V \rangle = -2\langle T \rangle.$$

Références

- [1] HOLSTEIN, Barry. *Topics in Advanced Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing company, 1991.
- [2] SCRUCCA, Claudio. *Advanced Quantum Mechanics*, Adresse : <http://documents.epfl.ch/users/s/sc/scrucca/www/teach.html>.
- [3] SCRUCCA, Claudio. *Quantum Field Theory*, Adresse : <http://documents.epfl.ch/users/s/sc/scrucca/www/teach.html>.
- [4] JACKSON, John David. *Classical Electrodynamics*, Wiley and Sons, Inc., 2001.
- [5] MAGGIORE, Michele. *A Modern Introduction to Quantum Field Theory*, Oxford Master Series, 2009.
- [6] DRELL, Sidney et James BJORKEN. *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Company, 1964.
- [7] MERZBACHER, Eugen. *Quantum Mechanics*, Wiley international edition, 1970.
- [8] FUDA, Michael et Edward FURLANI. *Zitterbewegung and the Klein Paradox for spin-zero particles*, American Journal of Physics – June 1982 – Volume 50, Issue 6.