

Annexe C: Equation de Dirac (incomplet)

Un peu de phénoménologie (Cosmology & Particles Astrophysics)

Dans l'Univers, aujourd'hui, seules subsistent, en tant que reliques du Big-bang, les particules stables ou à durée de vie très longues. Pourtant au tout début toutes les particules ont participé activement à l'évolution cosmique.

L'objet de ce qui suit est de nous familiariser avec les fondamentaux des théories modernes des particules.

Remarquons que les constituants de la matière connus aujourd'hui ont toutes un spin de $\frac{1}{2}$ (en unités \hbar) à la différence des médiateurs d'interaction comme par exemple, le photon qui a un spin de 1 et l'hypothétique graviton un spin de 2.

Il est donc du plus haut intérêt d'étudier l'équation relativiste qui décrit les particules de spin $\frac{1}{2}$.

P.A.M Dirac (1902-1984) est un des fondateurs de la théorie moderne quantique des champs. Ses œuvres sont des classiques et sa contribution essentielle est son équation relativiste pour les particules de spin $\frac{1}{2}$.

Il est instructif de constater que cette équation, établie, en partie pour de mauvaises raisons, est toujours valide aujourd'hui. Cette équation a été considérée historiquement comme un avatar de l'équation de Schrödinger d'une particule unique, avant d'être reconnue comme l'équation du mouvement du champ quantique relativiste similaire au champ scalaire que nous avons déjà traité.

Il est curieux de constater que pour des particules de spin $\frac{1}{2}$ qui obéissent au principe d'exclusion de Pauli, on peut obtenir une équation valide pour une particule unique (comment le principe d'exclusion, qui se réfère au fait que plusieurs particules ne peuvent pas être dans le même état, peut il s'appliquer si on ne considère qu'une particule ?), en supposant que tous les états d'énergie négative, ce qui posait un problème pour le champ scalaire) sont occupés (formant la "mer de Dirac").

Le principe d'exclusion de Pauli va alors interdire, aux particules d'énergie positives, les transitions les conduisant vers les énergies négatives de la "mer de Dirac".

Pour beaucoup d'applications il n'est pas nécessaire d'utiliser toute la boîte à outils de la théorie quantique des champs.

Nous allons traiter les particules de Dirac comme nous avons traité le champ classique de rayonnement en mécanique quantique élémentaire (en utilisant simplement le champ potentiel vectoriel et non pas son opérateur de champ associé). Nous présenterons quelques exemples astrophysiques et vers la fin de cette annexe nous nous intéresserons à la quantification du champ de Dirac.

Nous aurons alors toutes les bases pour aborder un cours approfondi de théorie quantique des champs.

Approche historique: cf cours INSA 4° année par le professeur F. Davoine

A partir de l'expression relativiste de l'énergie, $E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$, on peut construire la fonction de Hamilton (en introduisant l'énergie potentielle U) qui vaut alors :

$$H = U \pm c (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + m^2 c^2)^{1/2}$$

On a vu que le signe \pm est lié à la forme de la formule (on verra qu'il autorise des énergies négatives, et comment cela est traité par la "mer" de Dirac)

On est tenté d'appliquer les opérateurs associés aux grandeurs physiques pour obtenir l'équation de Klein Gordon.

Problème avec l'équation de Klein Gordon qui a conduit Dirac à établir sa propre équation (Cosmology & Particles Astrophysics)

Cette équation pose quelques problèmes (invoque la dérivée seconde par rapport au temps et l'intégrale du carré de la fonction d'onde sur tout l'espace dépend du temps).

Le problème qui a chagriné Dirac à l'époque est le suivant :

Avec l'équation de Schrödinger, où pour une particule libre ($U(\mathbf{r}) = 0$)¹, on utilise l'expression non relativiste de l'énergie cinétique,

$$E_{\text{cin}} = \mathbf{p}^2/2m, \tag{C1}$$

et qui s'écrit,

$$- [\hbar^2 \nabla^2 \psi(\mathbf{r},t) / 2m = [i\hbar(\partial_t \psi(\mathbf{r},t))], \tag{C.2}$$

on pouvait définir un courant conservé " le courant de probabilité".

L'équation de continuité pour ce courant était facile à établir en multipliant à gauche (C.2) par ψ^* , et à droite l'équation conjuguée par ψ et en soustrayant :

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \tag{C.3}$$

où le courant de probabilité est

$$\mathbf{j}(r,t) = (-i\hbar/2m)(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \tag{C.4}$$

et la densité de probabilité

$$\rho(\mathbf{r},t) = | \psi(\mathbf{r},t) |^2 \tag{C.5}$$

¹ Les lettres notées en caractères gras dans les équations et le texte désignent des vecteurs dans l'espace à 3 dimensions.

Donc si nous avons au départ une particule décrite par une fonction d'onde normalisée à l'unité, elle restera normalisée tout au long de son évolution temporelle.

Maintenant si nous regardons ce qui se passe avec l'équation relativiste de Klein Gordon (B.30)

$$\left(-\hbar^2 \nabla^2 + m^2 c^2\right) \varphi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \varphi}{c^2 \partial t^2} \quad (\text{C.6})$$

Alors

$$\left(\square + \mu^2\right) \varphi = 0 \quad (\text{C.7})$$

Avec $\mu = mc/\hbar$. Si nous posons $c = \hbar = 1$ alors $\mu = m$. Multiplions à gauche (C.7) par φ^* , le conjugué complexe de (C.7) et à droite par φ , et soustrayons, nous trouvons :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (\text{C.8})$$

avec

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{-i}{2m} (\varphi^* \nabla \varphi - \varphi \nabla \varphi^*) \quad (\text{C.9})$$

et

$$\rho(\mathbf{r}, t) = i \left(\varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \right) \quad (\text{C.10})$$

Bien que (C.8) ressemble à une équation de continuité, il n'est pas possible d'interpréter ρ dans (C.10) comme une densité de probabilité car elle n'est pas définie positive. Par exemple une onde plane dépendant du temps en e^{iEt} génère une valeur négative de ρ , alors que la dépendance selon e^{-iEt} n'aura pas ce problème.

La solution, comme nous l'avons vu en annexe B.3, consiste à interpréter φ comme un champ quantique dont les excitations peuvent être un nombre arbitraire de particules.

Comme le nombre de particules change, il n'y a pas de raison d'avoir une équation pour une seule particule.

Aussi le hamiltonien du champ quantique (B.38) est en fait défini positif.

Mais cela Dirac ne le savait pas, ce qui fait qu'il essaya une autre solution.

Le problème des énergies négatives vient de la dérivée seconde par rapport au temps (C.7).

Dans l'équation de Schrödinger, nous avons des dérivées secondes par rapport à l'espace, mais première par rapport au temps.

Pouvons-nous trouver une équation du premier ordre ?

On a pensé longtemps que c'était impossible, car la théorie de la Relativité exige qu'on traite le temps et l'espace sur le même pied, et une équation linéaire en dérivée d'espace n'est pas, par exemple invariante par des rotations d'espace contrairement à l'équation de Schrödinger.

Le point crucial de la méthode de Dirac fut d'introduire une fonction d'onde à plusieurs composantes et d'établir un système d'équations différentielles du premier ordre concernant à la fois le temps et l'espace.

C.2 L'Equation de Dirac suite : (Cosmology & Particles Astrophysics)

Rappelons la forme de l'équation

$$H\psi = i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\left(\alpha_1\frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2\frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3\frac{\partial}{\partial x^3}\right)\psi + \beta m\psi \quad (C.11)$$

Où α et β sont des matrices constantes $N \times N$ à déterminer et ψ est un vecteur colonne de N composantes (nous n'écrivons explicitement pas la matrice unitaire comme d'habitude).

L'idée est que chacune des composantes de ψ doit satisfaire l'équation de Klein Gordon :

$$(\square + m^2)\psi = 0$$

En multipliant (C11) par $i\partial_t$, et en utilisant l'équation elle même pour remplacer la dérivée temporelle de ψ dans le membre de droite nous obtenons :

$$-\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -M_{ij}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^i\partial x^j} - iN_j m\frac{\partial\psi}{\partial x^j} + m^2\beta^2\psi \quad (C.12)$$

(Rappelons que nous avons utilisé la convention de sommation d'Einstein), où

$$M_{ij} = \frac{\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i}{2} \quad (C.13)$$

et

$$N_i = \alpha_i\beta + \beta\alpha_i \quad (C.14)$$

Nous voyons que (C12) devient l'équation diagonale de Klein Gordon seulement si :

$$M_{ij} = \delta_{ij} \quad (C.15)$$

et

$$N_i = 0 \quad (C.16)$$

Alors en introduisant l'anti-commutateur $\{, \}$

$$\{A, B\} \equiv AB + BA \quad (\text{C.17})$$

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij} \quad (\text{C.18})$$

$$\{\alpha_i, \beta\} = 0 \quad (\text{C.19})$$

Nous devons, de plus avoir :

$$\beta^2 = I. \quad (\text{C.20})$$

De (C.18), il découle également :

$$\alpha_i^2 = I, \quad (\text{C.21})$$

pour tous les i .

Bien sur nous devons montrer qu'il existe des matrices remplissant ces conditions. Nous devons aussi montrer que (C.12) est invariant de Lorentz, c'est à dire qu'il a la même forme dans tous les référentiels inertiels.

Certaines propriétés de ces matrices sont faciles à trouver. Comme leur carré est la matrice unité, les valeurs propres doivent être ± 1 .

De (C.19) nous voyons que :

$$\alpha_i = \beta \alpha_i \beta.$$

Si on prend la trace de cette équation et en utilisant $Tr(AB) = Tr(BA)$, on voit que la trace de α_i doit être nulle ($\alpha^2 = \beta^2 = I$).

De même $Tr(\beta) = 0$. Comme la trace est la somme des valeurs propres qui sont +1 ou -1, nous voyons que nous devons avoir un nombre pair de dimensions. Les matrices de Pauli σ_i font presque l'affaire. Comme :

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = \delta_{ij} \quad (\text{C.22})$$

Elles peuvent servir pour représenter α .

Cependant, les matrices de Pauli couvrent l'espace 2x2 avec la matrice unité $\sigma_0 = I$.

Les matrices unité ne peuvent pas servir pour représenter β , car elles commutent avec toutes, en contradiction avec (C.19). Nous devons donc considérer des matrices 4x4.

Par essai/erreur, Dirac a trouvé une solution qui utilise les matrices de Pauli 2x2 comme parties (blocs) dans les matrices 4x4.

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.23})$$

et

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{C.24})$$

La fonction d'onde de Dirac ψ peut être considérée comme un vecteur colonne constitué de 4 composantes ψ_σ , avec $\sigma = 1, 2, 3, 4$.

Comme d'habitude, nous définissons la fonction d'onde conjuguée Hermitique $\psi^\dagger \psi$ comme un vecteur ligne de composantes $(\psi^{*1}, \psi^{*2}, \psi^{*3}, \psi^{*4})$.

Vérifions que nous pouvons former une probabilité définie positive à partir de $\psi^\dagger \psi$. Nous multiplions (C.11) à gauche par ψ^\dagger et le conjugué Hermitique de l'équation à droite par ψ , nous soustrayons les équations obtenues.

Ceci donne (en tenant compte que les matrices α_i et β sont Hermitiques):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (\text{C.25})$$

où ρ est en fait la valeur $\psi^\dagger \psi$ définie positive et :

$$\mathbf{j} = \psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi \quad (\text{C.26})$$

Où nous avons assemblé les matrices "composantes" α_i en un "vecteur de matrices" $\boldsymbol{\alpha}$.

Pour montrer l'invariance de Lorentz, il faut multiplier (C.11) à gauche par $\boldsymbol{\beta}$, et réarranger les termes pour obtenir:

$$i \left(\gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0} + \gamma^1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \gamma^2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \gamma^3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \psi - m\psi = 0 \quad (\text{C.27})$$

Ici nous avons introduit la notation très pratique $\gamma^0 = \beta$ et $\gamma^j = \beta \alpha_j$.

Ceci nous permet les relations d'anti-commutation dans la forme suggestive:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu} \quad (\text{C.28})$$

Soit en termes de blocs de matrices

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.29})$$

et

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{C.30})$$

L'équation de Dirac (C.27) peut maintenant être écrite dans une forme où son invariance de Lorentz est manifeste :

$$(i \not{\partial} - m) \psi = 0 \quad (\text{C.31})$$

Où le symbole "Barré" va être utilisé pour désigner une contraction arbitraire du quadri-vecteur avec l'ensemble des matrices γ , $\not{A} = \gamma^\mu A_\mu$

(Nota : comme je n'ai pas trouvé comment barrer en biais, j'ai barré horizontalement)

C.3 Solutions d'ondes planes

Considérons les solutions à l'équation libre de Dirac (C.31) qui décrivent des ondes planes d'énergie positive et de moment p , alors:

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2EV}} u(p) e^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \quad (\text{C.32})$$

où $u(p)$ est un quadri vecteur colonne. En insérant dans (C.31), nous trouvons l'équation de Dirac dans l'espace des Impulsions pour $u(p)$:

$$(\not{p} - m) u(p) = 0 \quad (\text{C.33})$$

En particulier, nous pouvons chercher des solutions au repos, $p = 0$. Alors seul le terme $\gamma^0 \partial / \partial t$ contribue et nous trouvons, avec la représentation (C.30) pour la matrice γ^0 :

$$-2m \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} u(0) = 0 \quad (\text{C.34})$$

Ce qui montre que nous ne pouvons prendre comme état de base que

$$u^1(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.35})$$

et

$$u^2(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.36})$$

Les deux composantes du bas doivent être nulles pour satisfaire (C.34), mais ceci nous laisse avec le problème que nous n'avons une base que pour un sous espace à deux dimensions couverts par les deux composantes supérieures.

De nouveau, les états à énergie négative sont appelés à la rescousse. Si nous essayons la solution ondes planes correspondant aux énergies négatives (ce qui transforme $p \rightarrow -p$)

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2EV}} v(-p) e^{+i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \quad (\text{C.37})$$

Alors l'équation de Dirac au repos devient :

$$2m \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} v(0) = 0 \quad (\text{C.38})$$

Qui a les solutions

$$v^1(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.39})$$

et

$$v^2(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{C.40})$$

(Nous verrons plus tard que les solutions à énergie négative sont en relation avec les antiparticules). Alors nous pouvons développer un quadri-spineur quelconque de Dirac (à quatre composantes) comme :

$$\psi(t) = e^{-iEt} \begin{pmatrix} \varphi \\ 0 \end{pmatrix} + e^{+iEt} \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \quad (\text{C.41})$$

avec φ et χ étant des bi-spineurs à deux composantes).

Vérifions ce qui arrive si $p \neq 0$. Alors nous pouvons toujours écrire

$$u(p) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (\text{C.42})$$

où φ et χ dépendent maintenant de p .

L'équation de Dirac a été construite pour donner $E = \pm p^0$ où p^0 a une valeur positive $p^0 = (m^2 + p^2)^{1/2}$. Si nous considérons les solutions à énergie positives, en insérant (C.42) dans (C.33) on voit que cela implique :

$$\chi = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{p^0 + m} \varphi \quad (\text{C.43})$$

En conséquence

$$u(p) = N \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{p^0 + m} \varphi \end{pmatrix} \quad (\text{C.44})$$

Où N est une constante de normalisation. De même, les solutions à énergie négatives $v(-p)$ sont données par:

$$v(-p) = N \begin{pmatrix} \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{p^0 + m} \chi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (\text{C.45})$$

Pour ces spineurs l'équation de Dirac devient :

$$(\not{p} - m) u(p) = 0 \quad (\text{C.46})$$

et

$$(\not{p} + m) v(-p) = 0 \quad (\text{C.47})$$

respectivement.

Définissons le spineur de Dirac $\bar{\psi}$ conjugué par,

$$\bar{\psi}(x) \equiv \psi^\dagger(x) \gamma^0 \quad (\text{C.48})$$

Donc,

$$\bar{u}(p) \equiv u(p)^\dagger \gamma^0 \quad (\text{C.49})$$

et

$$\bar{v}(-p) \equiv v(-p)^\dagger \gamma^0 \quad (\text{C.50})$$

En utilisant l'identité

$$\gamma^0 (\gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 = \gamma^\mu \quad (C.51)$$

qui peut être facilement vérifiée, nous obtenons les équations suivantes pour les spineurs conjugués ~~et~~

$$\bar{u}(p) (\not{p} - m) = 0 \quad (C.52)$$

et

$$\bar{v}(-p) (\not{p} + m) = 0 \quad (C.53)$$

En multipliant (C.46) à gauche par $\not{\gamma}^\mu$, (C52) à droite par $\not{\gamma}^\mu u$, en additionnant ces équations et en utilisant la relation d'anti-commutation :

$$\{\gamma^\nu, \not{p}\} = 2p^\nu \quad (C.54)$$

nous trouvons

$$m\bar{u}(p)\gamma^\mu u(p) = p^\mu \bar{u}(p)u(p) \quad (C.55)$$

et

$$m\bar{v}(-p)\gamma^\mu v(-p) = -p^\mu \bar{v}(-p)v(-p) \quad (C.56)$$

En normalisant les bi-spineurs φ et χ à l'unité ($\varphi^\dagger\varphi = \chi^\dagger\chi = 1$), nous choisissons de normaliser les quadri-spineurs non pas à l'unité mais plutôt par la condition :

$$\bar{u}(p)u(p) = 2m \quad (C.57)$$

$$\bar{v}(-p)v(-p) = -2m \quad (C.58)$$

qui sont des conditions de covariance relativiste. Ceci signifie, par exemple que $u^\dagger u = 2E$. Alors selon (C.55) et (C.56)

$$\bar{u}(p)\gamma^\mu u(p) = 2p^\mu \quad (C.59)$$

et

$$\bar{v}(-p)\gamma^\mu v(-p) = 2p^\mu \quad (C.60)$$

Ceci fixe la constante de normalisation N à $(p^0 + m)^{1/2}$, alors

$$u^r(p) = \sqrt{p^0 + m} \begin{pmatrix} \varphi^r \\ \frac{\sigma \cdot \mathbf{p}}{p^0 + m} \varphi^r \end{pmatrix} \quad (C.61)$$

Où nous choisissons comme valeur des états des bases bi-spinorielles :

$$\varphi^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (C.62)$$

et

$$\varphi^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{C.63})$$

de même

$$v^s(-p) = \sqrt{p^0 + m} \begin{pmatrix} \frac{\sigma \cdot \mathbf{p}}{p^0 + m} \chi^s \\ \chi^s \end{pmatrix} \quad (\text{C.64})$$

Couplage à l'électromagnétisme

La manière la plus simple d'introduire l'électromagnétisme est d'opérer la substitution de couplage minimum, comme d'habitude.

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - eA^\mu \quad (\text{C.65})$$

Où A^μ est le quadri-potentiel électromagnétique. En retournant à l'équation de Dirac dans sa forme hamiltonienne cela donne:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = [\alpha \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{A}) + \beta m + e\Phi] \psi \quad (\text{C.66})$$

C.5 Invariance de Lorentz

Bien que nous ayons écrit l'équation de Dirac (C.31) sous une forme qui paraît invariante de Lorentz .

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi(x) = 0 \quad (\text{C.67})$$

Nous devons vérifier que les matrices de Dirac et les fonctions d'onde de Dirac, se transforment convenablement. Conformément au postulat de Relativité, nous devons trouver pour un autre système repéré par

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu \quad (\text{C.68})$$

(par exemple un référentiel inertiel animé d'un mouvement uniforme) une équation de la même forme:

$$(i\gamma'^\mu \partial'_\mu - m) \psi'(x') = 0 \quad (\text{C.69})$$

($m' = m$, car la masse est un invariant). Essayons d'utiliser les mêmes matrices constantes de Dirac (c.a.d $\gamma'^\mu = \gamma^\mu$, on peut prouver que c'est possible) et faisons une transformation linéaire du spineur de Dirac:

$$\psi'(x') = S\psi(x) \quad (\text{C.70})$$

Inversons,

$$\psi(x) = S^{-1}\psi'(x') \quad (\text{C.71})$$

Son insertion dans (C.31) donne

$$\left(i\gamma^\mu \Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu - m\right) S^{-1}\psi'(x') = 0 \quad (\text{C.72})$$

Où nous avons utilisé (2.31). n multipliant à gauche par S nous trouvons

$$\left(iS\gamma^\mu S^{-1}\Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu - m\right) \psi'(x') = 0 \quad (\text{C.73})$$

Ceci est de la forme désirée (C.69) si nous pouvons trouver un S tel que:

$$S\gamma^\mu S^{-1}\Lambda^\nu{}_\mu = \gamma^\nu \quad (\text{C.74})$$

où

$$\Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu = S^{-1}\gamma^\mu S \quad (\text{C.75})$$

Nous devons maintenant trouver S tel que (C.75) est satisfait. Considérons une "propulsion" de Lorentz dans la direction de x^1 (voir équation (2.22), et réécrivons pour la circonstance

$$\beta = \tanh \zeta \quad (\text{C.76})$$

Alors

$$\Lambda(x^1; \zeta) = \begin{pmatrix} \cosh \zeta & -\sinh \zeta & 0 & 0 \\ -\sinh \zeta & \cosh \zeta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{C.77})$$

et nous voyons que pour que (C.75) soit satisfait

$$\begin{aligned} S^{-1}\gamma^0 S &= (\cosh \zeta)x^0 - (\sinh \zeta)x^1 \\ S^{-1}\gamma^1 S &= -(\sinh \zeta)x^0 + (\cosh \zeta)x^1 \\ S^{-1}\gamma^2 S &= \gamma^2 \\ S^{-1}\gamma^3 S &= \gamma^3 \end{aligned} \quad (\text{C.78})$$

$$(\text{C.79})$$

En utilisant les relations d'anti-commutation des matrices γ , ceci peut synthétisé (comme on peut le vérifier) par:

$$S^{-1}\gamma^\mu S = \left(\cosh \frac{\zeta}{2} + \gamma^0 \gamma^1 \sinh \frac{\zeta}{2}\right) \gamma^\mu \left(\cosh \frac{\zeta}{2} - \gamma^0 \gamma^1 \sinh \frac{\zeta}{2}\right) \quad (\text{C.80})$$

qui montre que :

$$S = \cosh \frac{\zeta}{2} - \gamma^0 \gamma^1 \sinh \frac{\zeta}{2} \quad (\text{C.81})$$

Les autres matrices de transformation S pour les autres transformations de Lorentz peuvent être trouvées de la même manière et cela peut être résumé par:

$$S = \cosh \frac{\zeta}{2} - \gamma^0 \gamma^i \sinh \frac{\zeta}{2} \quad (\text{C.82})$$

pour une propulsion de paramètre ζ le long de l'axe x^i et

$$S = \cos \frac{\omega}{2} - \gamma^j \gamma^k \sin \frac{\omega}{2} \quad (\text{C.83})$$

pour une rotation d'angle ω autour de l'axe x^i ($i, j, k = 1, 2, 3$ cyclique).

De la même manière on peut montrer que l'équation de Dirac conjuguée

$$i\partial_\mu \bar{\psi}(x) \gamma^\mu + m \bar{\psi}(x) = 0 \quad (\text{C.84})$$

sera de la même forme dans le système ' pourvu que:

$$\bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x) S^{-1} \quad (\text{C.85})$$

Annexe : Cours INSA 66

Solution de Dirac : Linéarisation de l'équation

Cela a conduit Dirac à "linéariser" cette équation en considérant la quantité sous la racine carrée comme un carré parfait :

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + m^2 c^2 = (\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_4 mc)^2,$$

les coefficients α_i étant à déterminer.

Si on développe, on voit qu'il n'y a pas de solutions avec des scalaires, mais qu'on peut en trouver si on considère les α_i comme des matrices (et qu'on applique les règles opératoires des matrices).

Il existe plusieurs groupes de matrices qui satisfont à ces conditions, qui conduisent à des solutions équivalentes.

Elles doivent anti-commuter $\alpha_1 \alpha_2 = -\alpha_2 \alpha_1$ etc., avec un carré : $\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \alpha_4^2 = 1$.

On remarque (mais est-ce important ?) que ces coefficients définissent une base d'un espace constituée d'éléments qui sont comme une racine carrée des vecteurs d'une base de l'espace vectoriel sur lequel est défini le quadri vecteur énergie impulsion.

Celles adoptées par Dirac sont :

$$\alpha_1 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad \alpha_2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad \alpha_3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad \alpha_4 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$$

On peut vérifier qu'elles sont solutions de l'équation.

L'équation de Hamilton devient :

$$H = U - c \cdot \alpha_1 p_x - c \cdot \alpha_2 p_y - c \cdot \alpha_3 p_z - c^2 \cdot \alpha_4 m$$

Et l'opérateur hamiltonien de Dirac

$$H = U + i \cdot c \cdot \alpha_1 \cdot \hbar \cdot \partial/\partial x + i \cdot c \cdot \alpha_2 \cdot \hbar \cdot \partial/\partial y + i \cdot c \cdot \alpha_3 \cdot \hbar \cdot \partial/\partial z - \alpha_4 m c^2$$

On peut évidemment le développer sous forme de matrice 4 x 4 en développant les coefficients matriciels.

L'équation de Dirac correspondant à l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$H \psi = E \psi$$

Relation entre matrices pour l'équation de Dirac, qu'on appliquera à un vecteur colonne ψ

On est alors conduit à prendre comme fonction ψ un vecteur à 4 composantes $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$, chacune de ces fonctions étant une fonction ordinaire de x, y, z, t .

On aura alors :

$$\psi \psi^* = \psi_1 \psi_1^* + \psi_2 \psi_2^* + \psi_3 \psi_3^* + \psi_4 \psi_4^*$$

Et ce produit aura la signification probabiliste habituelle.

La détermination de $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$, est alors ramenée à la résolution de 4 équations simultanées aux dérivées partielles du premier ordre qu'il n'est pas difficile d'établir.

$$\begin{aligned} i/\hbar [(E-U)/c + m \cdot c] \psi_1 + (\partial/\partial x - i \cdot \partial/\partial y) \psi_4 + (\partial/\partial z) \psi_3 &= 0 \\ i/\hbar [(E-U)/c + m \cdot c] \psi_2 + (\partial/\partial x + i \cdot \partial/\partial y) \psi_3 - (\partial/\partial z) \psi_4 &= 0 \\ i/\hbar [(E-U)/c + m \cdot c] \psi_3 + (\partial/\partial x - i \cdot \partial/\partial y) \psi_2 + (\partial/\partial z) \psi_1 &= 0 \\ i/\hbar [(E-U)/c + m \cdot c] \psi_4 + (\partial/\partial x + i \cdot \partial/\partial y) \psi_1 - (\partial/\partial z) \psi_2 &= 0 \end{aligned}$$

Le spin d'après la théorie de Dirac.

Au lieu d'utiliser les matrices $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ ci dessus, on peut envisager d'utiliser les 5 matrices suivantes, également à 4 lignes et 4 colonnes

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} |0 & 1 & 0 & 0| \\ |1 & 0 & 0 & 0| \\ |0 & 0 & 0 & 1| \\ |0 & 0 & 1 & 0| \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} |0 & -i & 0 & 0| \\ |i & 0 & 0 & 0| \\ |0 & 0 & 0 & -i| \\ |0 & 0 & i & 0| \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} |1 & 0 & 0 & 0| \\ |0 & -1 & 0 & 0| \\ |0 & 0 & 1 & 0| \\ |0 & 0 & 0 & -1| \end{pmatrix}$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} |0 & 0 & 1 & 0| \\ |0 & 0 & 0 & 1| \\ |1 & 0 & 0 & 0| \\ |0 & 1 & 0 & 0| \end{pmatrix} \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} |1 & 0 & 0 & 0| \\ |0 & 1 & 0 & 0| \\ |0 & 0 & -1 & 0| \\ |0 & 0 & 0 & -1| \end{pmatrix}$$

(Dirac a également introduit une matrice ρ_2 dont nous ne ferons pas usage ici).

On peut remarquer:

- que chaque σ commute avec chaque ρ ,
- que les ρ anti-commutent entre elles,
- que les α , ρ et σ sont reliées par :

$$\alpha_1 = \rho_1 \cdot \sigma_x, \quad \alpha_2 = \rho_1 \cdot \sigma_y, \quad \alpha_3 = \rho_1 \cdot \sigma_z, \quad \alpha_4 = \rho_3$$

L'hamiltonien de Dirac peut donc s'écrire :

$$H = U - c \cdot \rho_1 (\sigma_x \cdot p_x + c \cdot \sigma_y \cdot p_y + c \cdot \sigma_z \cdot p_z) - \rho_3 \cdot m c^2$$

(p_x, p_y, p_z , représentant ici des opérateurs)

Considérons alors un électron dans un potentiel électrostatique central $U(r)$.

Soit L_z son moment, cinétique orbital projeté sur O_z .

- En mécanique classique, nous savons que c'est une constante du mouvement.
- En mécanique ondulatoire de Schrödinger, nous savons qu'il a, aussi une valeur bien déterminée : $m\hbar$ et nous avons remarqué que ceci provenait du fait que les fonctions d'onde correspondant aux états stationnaires sont les fonctions propres de l'opérateur L_z . En d'autres termes, ceci provient du fait les opérateurs L_z et H commutent.

Proposons-nous de voir s'il en est encore de même en mécanique de Dirac.

Nous avons déjà montré (c'est le produit vectoriel de l'impulsion par la distance à l'axe O_z , projeté sur O_z , il vaut donc $x \cdot p_y - y \cdot p_x$) que l'opérateur L_z était égal à (on a remplacé les " p " par les opérateurs associés):

$$L_z = \hbar/i (x \partial_y - y \partial_x)$$

On peut vérifier facilement (je l'ai fait), que cet opérateur commute avec p_z et avec les matrices σ et ρ , par contre il ne commute pas avec p_x et p_y et on a:

$$[L_z, p_x] = i \hbar p_y \quad \text{et} \quad [L_z, p_y] = -i \hbar p_x$$

(Ce que j'ai aussi vérifié)

Formons alors le commutateur :

$$\begin{aligned} L_z H - H L_z &= -c \rho_1 [\sigma_x (L_z p_x - p_x L_z) + \sigma_y (L_z p_y - p_y L_z)] \\ &= -c \rho_1 [\sigma_x (i \hbar p_y) + \sigma_y (-i \hbar p_x)] \\ &= i \hbar c \rho_1 [\sigma_x p_y - \sigma_y p_x] \end{aligned} \quad (8)$$

Il est facile de vérifier que la parenthèse n'est pas nulle. Donc, ce commutateur n'est pas nul, et, en mécanique de Dirac le moment cinétique L_z ne sera pas une constante du mouvement.

Formons alors le commutateur

$$[\sigma_z, H]$$

On vérifie aisément que σ_z commute avec p_x, p_y, p_z , mais ne commute pas avec σ_x, σ_y et que l'on a :

$$[\sigma_z, \sigma_x] = 2i \sigma_y \quad [\sigma_z, \sigma_y] = -2i \sigma_x,$$

d'où:

$$\begin{aligned} \sigma_z H - H \sigma_z &= -c \rho_1 [p_x (\sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z) + p_y (\sigma_z \sigma_y - \sigma_y \sigma_z)] \\ &= -c \rho_1 [p_x (2i \sigma_y) + p_y (2i \sigma_x)] \\ &= 2i c \rho_1 [\sigma_x p_y - \sigma_y p_x] \end{aligned} \quad (9)$$

Ce commutateur n'est pas nul non plus. Mais, en rapprochant (8) et (9) on constate que l'on a :

$$(L_z + \frac{1}{2} \hbar \sigma_z) \cdot H - H (L_z + \frac{1}{2} \hbar \sigma_z) = 0$$

Ceci montre que c'est la grandeur associée à l'opérateur

$$L_z + \frac{1}{2} \hbar \sigma_z,$$

qui est, dans ce cas, une constante du mouvement.

Par analogie avec la mécanique classique et la mécanique ondulatoire non relativiste, on voit que l'on est conduit à dire que l'opérateur spin $S_z = \frac{1}{2} \hbar \sigma_z$ vient naturellement se joindre à L_z pour donner le moment angulaire total, constante du mouvement

On peut montrer que, dans ce cas encore, bien que la fonction ψ ne soit plus une simple fonction scalaire, le résultat d'une mesure effectuée sur le spin fournit une des valeurs propres $\frac{1}{2} \hbar \sigma_z$, c'est à dire $\pm \hbar/2$.

On démontrerait également que le moment magnétique s'introduit, lui aussi, automatiquement dans les équations de Dirac avec la valeur $e \hbar/2 \mu_0 c$, c'est-à-dire 1 magnéton de Bohr.

(Cette démonstration nécessite l'usage des équations du mouvement dans un champ électromagnétique et non plus électrostatique source qui implique des calculs plus complets).

Les caractéristiques essentielles de l'électron se retrouvent bien dans l'équation de Dirac sans faire appel modèle d'une sphère en rotation sur lequel s'étaient fondées des 'théories antérieures.

Remarque sur les états à énergie négative. théorie des lacunes

L'introduction d'un double signe dans l'expression du hamiltonien relativiste amène à voir la possibilité de valeurs négatives de l'énergie (car la fixation de l'énergie potentielle de la particule au repos $P = mc^2$ fixe l'origine des énergies)

C'est là un point capital de la théorie de Dirac et la considération des énergies des deux signes s'est montrée nécessaire pour interpréter correctement, par la théorie de, Dirac, divers phénomènes et notamment l'effet Compton. Mais, ce fait du point de vue physique, est difficile à concevoir, et la nature ne semblerait rien montrer qui ressemblait à des corpuscules à énergie négative.

Pour surmonter cette difficulté, Dirac suggéra que les états d'énergie négatives étaient en réalité accessibles eux électrons, mais se trouvaient, d'ordinaires occupés en totalité, un peu comme le sont, dans un métal tous les états d'énergie inférieurs au niveau de Fermi.

Les électrons qui se trouvent dans ces états ne se manifesteraient pas et, notamment, leur charge serait neutralisée par des charges positives qui échappent également à notre observation.

Cette hypothèse laissait prévoir que, sous l'effet d'une excitation convenable (on peut montrer qu'il faut, pour cela dispenser une énergie supérieure à $2 mc^2$), un électron pouvait se trouver porté d'un état d'énergie négative à un état d'énergie positive. Le résultat d'un tel saut est l'apparition d'un électron normal et la disparition d'un des électrons occultes, ce qui entraîne la création d'une lacune parmi les états à énergie négative. Oppenheimer devait montrer que le comportement d'une telle lacune dans un champ électromagnétique est le même -que celui d'un électron qui serait chargé positivement.

Ces prévisions ont été vérifiées par l'expérience. Nous avons déjà signalé en effet (cf. cours de Physique de la matière) que des photons d'énergie suffisante tombant sur la matière engendrent, avec une certaine probabilité (croissante avec l'énergie) une paire d'électrons de charges opposées.*

Inversement, un électron positif peut se combiner à un électron négatif. Dans le langage précédent, on dit qu'une lacune existant dans le continuum des états d'énergie négative, est comblée par un électron ordinaire, c'est-à-dire négatif, pour donner de l'énergie, électromagnétique.

Nous signalerons simplement que des propriétés analogues ont été mises en évidence pour d'autres particules que les électrons, mais que le traitement théorique de ces problèmes est des plus compliqué.