

L'équation de Dirac

Le mariage de la relativité et de la mécanique quantique et la naissance de l'antimatière

Notes de Pascal Debu

25^{ème} festival d'astronomie de Fleurance, 7-14 août 2015

- Prérequis :
 - o notions de mécanique quantique, fonction d'onde et spin, équation de Schrödinger
 - o expression de l'énergie en relativité restreinte, quadrivecteurs
 - o algèbre linéaire, calcul matriciel, dérivées partielles

- Objectifs :
 - o montrer comment la tentative de réconcilier l'équation de Schrödinger et la relativité permet d'introduire naturellement le spin de l'électron et a conduit Dirac à la prédiction de l'existence du positron, antiparticule de l'électron.

- Bibliographie
 - o Histoire :
 - B. Fernandez, *De l'atome au noyau*, (2006) Ellipses
 - I. Pavel, *La prédiction de l'antimatière par Dirac*, lien Bibnum <https://www.bibnum.education.fr/sites/default/files/Dirac-analyse.pdf>
 - o Formalisme :
 - A. Messiah, *Mécanique quantique*, (2003) Dunod
 - A. Seiden, *Particle Physics*, (2005) Pearson & Addison Wesley
 - H. Feshbach & F. Villars, *Elementary Relativistic Wave Mechanics of Spin 0 and Spin 1/2 Particles*, Rev. Modern Phys. 30 (1958) 24-45
 - A. Calogheracos & N. Dombey, *History and physics of the Klein paradox*, Contemporary Physics 40 (1999), 313-321

Repères historiques

- relativité restreinte
 - 1864 : équations de Maxwell
 - 1881-1887 : expériences de Michelson et Morley, pas d'éther ?
 - 1895 : transformations de Lorentz (contraction des champs électrostatiques, augmentation de la masse des électrons en mouvement)
 - 1898 : Poincaré propose que $c =$ constante dans toutes les directions, sans abandonner l'éther
 - 1905 : Einstein : principe de relativité et $c =$ constante
 - (1907 : Espace de Minkowski mathématisation de la théorie d'Einstein et inspiré d'une publication de Poincaré en 1905)
- mécanique quantique
 - 1900 : loi de Planck pour le corps noir \Rightarrow constante de Planck h
 - Einstein 1905 : effet photoélectrique \Rightarrow photons
 - modèle de Bohr (orbites stables, transitions par émission/absorption d'un photon, quantification du moment cinétique $L = n\hbar$)
 - de Broglie 1923 : particule onde $\lambda = h/p$
 - hypothèse présentée par Schrödinger en conférence. Réaction de Debye : onde sans équation !? \Rightarrow
- équation de Schrödinger 1925

Schrödinger aurait d'abord écrit l'équation dite de Klein-Gordon (5 publications plus tard sur ce sujet en 1927 dont Klein et Gordon et Fock), mais spectres atomes hydrogénoïdes incorrects (Paschen 1916) \Rightarrow retour aux formules de la mécanique newtonienne

- spin : (Kronig non publié à cause de Pauli, Bichowsky et Urey non publié à cause du facteur de Thomas (1926) non connu d'eux) proposition publiée par Goudsmit et Uhlenbeck (1926) encouragés par Ehrenfest : $g=2$ OK (facteur de Landé de l'électron introduit en 1921 pour expliquer l'effet Einstein-Haas, pour lequel un facteur 2 manque si on interprète le moment magnétique d'un corps en prenant en compte une rotation des électrons), effet Zeeman anormal, mais problème dans la structure fine car facteur de Thomas ignoré !
- équation de Pauli et Darwin (1927)

Paul Adrien Dirac (1902-1984)

- thèse (maths pures) 1926 : équivalence entre la mécanique matricielle de Heisenberg et la mécanique ondulatoire de Schrödinger
- 1927 : premier formalisme mathématique de la théorie des champs (quantification du champ électromagnétique)
- 1928 : équation de Dirac (insatisfait par l'équation de Klein-Gordon du 2nd ordre prédisant des solutions d'énergie négative et des densités de probabilité négatives), explication du spin et de $g = 2$
- 1931 : prédiction antiélectron, antiproton
- même article : monopole magnétique \Rightarrow quantification charge
- fonction δ de Dirac
- statistique des fermions
- prix Nobel 1933
- Équation de Dirac (1928) :
 - premier ordre
 - fonction d'onde à quatre composantes interconnectées (spinéur)
 - densités de probabilité positive
 - spin de l'électron : deux composantes
 - facteur de Landé $g = 2$
 - quid des deux autres composantes d'énergie négative ?
 - rejet ?
 - proton ? Weyl critiqué par Dirac (1929)
 - 1929 : mer de Dirac (états d'énergie négatives presque tous occupés –principe de Pauli 1925–, les trous se comportent comme des particules de charge positive, les protons ? (neutrons pas encore découverts : électrons 1897 Thomson, protons 1918 Rutherford, neutrons 1932 Chadwick), masse plus grande à cause de la mer ?
 - fortes critiques de la communauté et notamment de Bohr et Pauli
 - 1931 : Dirac postule l'existence de l'anti-électron et de l'anti-proton
 - 1932 : découverte du positron (ainsi nommé par Anderson dans son article de 1933) par Anderson à Caltech, confirmée par Blackett et Occhialini à Cambridge. Nouvelle reçue avec scepticisme, mais les doutes se dissipent et la prédiction de Dirac est confirmée.

Plan du cours

A. Introduction

- i. $E = h\nu$; $\lambda = h / p$; interférences électrons
- ii. équation d'onde « classique »
- iii. équation de Schrödinger

B. Le spin de l'électron

- i. spin de l'électron : Stern-Gerlach 1922 (quantification de L et spin $1/2$), effet Zeeman anormal)
- ii. fonction d'onde à 2 composantes
- iii. matrices de Pauli

C. Équation de Klein-Gordon

- i. $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \rightarrow$ équation de Klein-Gordon

D. Motivations de Dirac

- i. équation de continuité Schrödinger
- ii. équation de continuité K-G
- iii. problèmes de l'équation K-G :
second ordre en temps, probabilités et énergies négatives

E. Établissement de l'équation de Dirac

- i. Équation du 1^{er} ordre \rightarrow on sort du cadre : nécessité des opérateurs α et β et d'une fonction d'onde à 4 composantes
- ii. matrices γ
- iii. équation de continuité, probabilités positives

F. Solutions de l'équation de Dirac libre

- i. solutions à énergie positive et solutions à énergie négative

G. Représentation de Newton-Wigner

- i. définition
- ii. opérateur position moyenne

H. Équation de Dirac en présence d'un champ électromagnétique

- i. impulsion et quantité de mouvement
- ii. lagrangien des forces de Lorentz
- iii. relations de commutation et principe de correspondance pour l'impulsion
- iv. hamiltonien en présence d'un champ électromagnétique
- v. approximation non relativiste
- vi. solution à énergie positive : spin et facteur de Landé g

I. Interprétation des solutions à énergie négative

- i. Mer de Dirac

J. Conjugaison de charge, masse et charge du positron

K. Paradoxe de Klein

- i. barrière de potentiel Schrödinger
- ii. Paradoxe de Klein

L. Zitterbewegung

- i. représentation de Heisenberg
- ii. équation du mouvement

M. Épilogue. Sortie du problème ?

- i. seconde quantification : théorie des champs
- ii. réhabilitation de l'équation de K-G.

Corps du cours

A - Introduction

- $E = h\nu$; $\lambda = h / p$; interférences électrons
- équation d'onde, équation de Schrödinger, principe de correspondance

Après l'introduction de la constante h par Planck en 1900 pour décrire correctement le spectre de rayonnement du corps noir, et l'explication en 1905 de l'effet photoélectrique par Einstein, on se retrouve avec des phénomènes électromagnétiques tantôt ondulatoires, tantôt corpusculaires.

La propagation des ondes électromagnétiques est décrite par une équation d'onde :

$$\frac{\partial^2 A^\mu}{\partial t^2} = c^2 \Delta A^\mu \quad ; \quad A^\mu = (V, \vec{A})$$

Onde plane en notation complexe (seule la partie réelle a un sens en physique classique) :

$$A^\mu(\vec{r}, t) = \text{Re} \left[a^\mu \exp \left[-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \right] \right]$$

Un photon d'énergie E correspond à une onde de fréquence $\nu = E / h$: l'équation de propagation donne la relation : $\omega^2 = c^2 k^2 \Leftrightarrow E^2 = p^2 c^2$ si on se souvient que :

$$\omega = 2\pi\nu \Rightarrow E = \hbar\omega \quad ; \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} .$$

Motivé par le modèle de Bohr de l'atome, dans lequel les électrons ne peuvent se trouver que sur des orbites particulières, assurant ainsi la stabilité des atomes, De Broglie fait en 1923 l'hypothèse que les électrons se comportent comme des ondes de longueur d'onde $\lambda = h / p$, tout comme les ondes électromagnétiques peuvent se comporter comme des particules. Cette hypothèse implique la possibilité de phénomènes d'interférence, ils seront observés en 1927 par Davisson et Germer.

Schrödinger, motivé par Debye, cherche alors l'équation d'onde de l'électron, car l'équation habituelle ne marche pas puisque la relation entre l'énergie et la quantité de mouvement n'est pas la même. En mécanique classique : $E = p^2 / 2m + E_p$.

Si on s'inspire de l'équation d'onde du photon, on voit que pour une onde plane :

$$i\hbar \frac{\partial A_\mu}{\partial t} = EA_\mu \quad \text{et} \quad -i\hbar \vec{\nabla} A_\mu = \vec{p} A_\mu, \quad \text{et donc, pour satisfaire la relation précédente, en}$$

utilisant le principe de correspondance $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Leftrightarrow E$ et $-i\hbar \vec{\nabla} \Leftrightarrow \vec{p}$, il faut écrire :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + E_p \psi, \quad \text{où la fonction d'onde } \psi \text{ décrit un électron ayant une}$$

énergie potentielle E_p en plus de son énergie cinétique.

Schrödinger calcule les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène en partant de cette équation et obtient des valeurs en bon accord avec les mesures, et notamment les séries de Lyman, Balmer, Paschen.

$$E_0 = 13,6 \text{ eV} \quad ; \quad E_n = -E_0 / n^2$$

Série de Lyman (ultraviolet) :

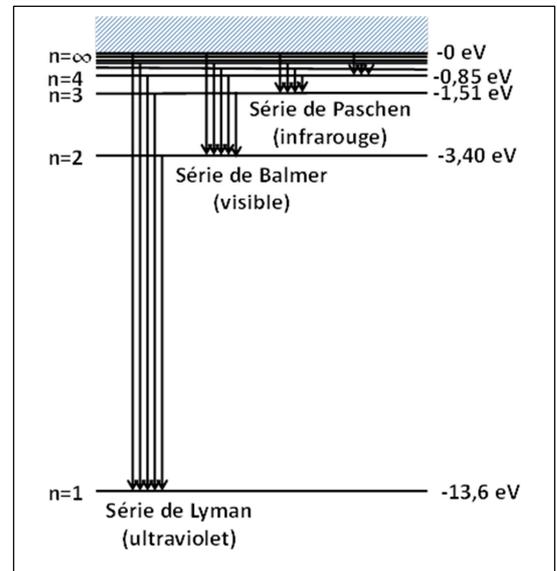
$$\lambda^{-1} = R_H \left(1 - 1/n^2 \right) \quad ; \quad R_H = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

Série de Balmer (1885) (visible) :

$$\lambda^{-1} = R_H \left(1/2^2 - 1/n^2 \right)$$

Série de Paschen (infrarouge) :

$$\lambda^{-1} = R_H \left(1/3^2 - 1/n^2 \right)$$



B - Équation de Klein-Gordon

$$- E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \quad : \quad \text{équation de Klein-Gordon}$$

Malgré cette avancée majeure, la situation reste insatisfaisante. pour plusieurs raisons : depuis 1905, on connaît la relativité restreinte, et l'équation de Schrödinger est incompatible avec les principes de la relativité (invariance des lois de la physique par changement de référentiel galiléen).

En fait Schrödinger avait commencé par écrire une équation compatible avec la relativité. Suivant la méthode utilisée précédemment, on veut appliquer le principe de correspondance $E \rightleftharpoons i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$; $\vec{p} \rightleftharpoons -i\hbar \vec{\nabla}$ à la relation de la relativité :

$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$, on obtient l'équation de Klein-Gordon :

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \Delta \psi + m^2 c^4 \psi .$$

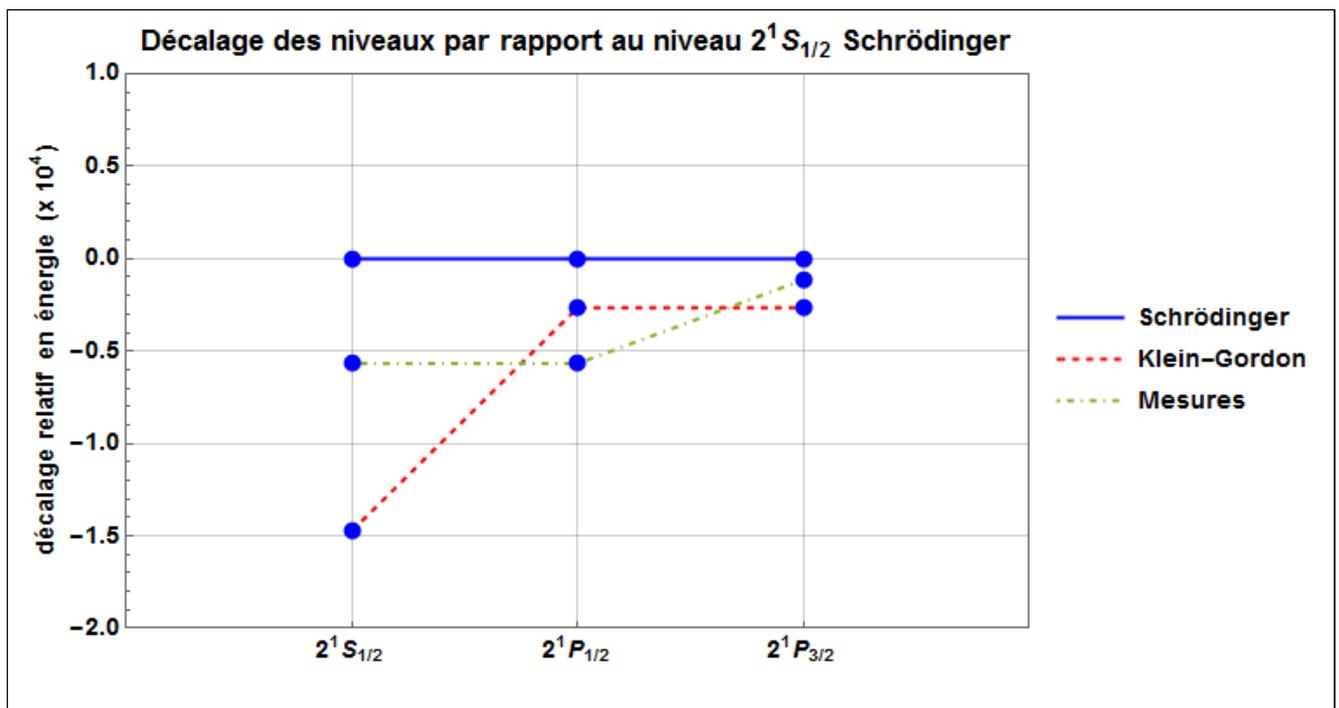
En calculant les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène avec cette équation, Schrödinger a bien trouvé les séries spectroscopiques précédentes, mais la structure fine des raies –c'est-à-dire la dépendance de l'énergie d'un niveau n avec le moment cinétique orbital de l'électron – (Sommerfeld 1916, orbites elliptiques), déjà très bien mesurée (Paschen 1916) est mal reproduite.

Ainsi, les niveaux $n=2$, $l=1$ sont dégénérés, ce qui n'est pas le cas expérimentalement ($2^1S_{1/2} = 2^1P_{1/2} \neq 2^1P_{3/2}$). L'équation non relativiste donne finalement de meilleurs résultats, bien qu'eux aussi en accord médiocre avec les mesures.

Exemple :

- Structure fine du niveau $n=2$:

Noter que ces corrections à l'énergie d'un niveau donné sont de l'ordre de 10^{-4} seulement !



La raison, qui sera comprise plus tard, est que les corrections dues aux effets relativistes (vitesse de l'électron de l'atome d'hydrogène de l'ordre de 1% de la vitesse de la lumière) sont partiellement compensées par celles dues au spin de l'électron (voir paragraphe suivant), qui induit un moment magnétique intrinsèque pour l'électron, moment magnétique qui interagit avec le champ électromagnétique créé par le proton et entraîne un décalage des niveaux d'énergie. Cette compensation partielle fait que les niveaux d'énergie calculés avec l'équation de Schrödinger sont en meilleur accord avec l'expérience que l'équation de Klein-Gordon.

C - Le spin de l'électron

- *spin de l'électron : Stern-Gerlach 1922 (quantification de L et spin $1/2$), effet Zeeman anormal)*
- *fonction d'onde à 2 composantes*

- *matrices de Pauli ; propriétés, relations de commutation et d'anti commutation*

Même si l'équation de Schrödinger décrit assez bien les électrons dans les atomes, les physiciens se heurtent à des phénomènes incompris (effet Zeeman anormal 1896, expérience de Stern et Gerlach (1922), structure hyperfine des raies spectrales), qui ne trouvent une explication satisfaisante que par l'introduction (Goudsmit et Uhlenbeck, 1925) d'une propriété supplémentaire de l'électron : le spin, ou moment cinétique intrinsèque. Le spin \vec{S} s'ajoute au moment cinétique orbital $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$ pour former le moment cinétique total de l'électron.

De ce fait, il possède un moment magnétique intrinsèque qui interagit avec le champ magnétique extérieur : en présence d'un champ magnétique, un électron acquiert une énergie supplémentaire ($q = -e$) : $\Delta E = -g \frac{q}{2m} \vec{S} \cdot \vec{B}$, avec $g \simeq 2$, analogue à la

relation classique $\Delta E = -\frac{q}{2m} \vec{L} \cdot \vec{B}$ au facteur mystérieux g près (facteur de Landé, 1921).

Il faut donc ajouter « à la main » un terme supplémentaire dans l'équation de Schrödinger pour prendre en compte cette variation d'énergie (équation de Pauli, 1927) pour le calcul des spectres atomiques, notamment.

Comme les autres quantités physiques, le spin est une observable, chacune de ses composantes est décrite par un opérateur linéaire hermitien, qui peut donc être représenté par une matrice si on fixe une base des états : $S_{x,y,z} = \frac{\hbar}{2} \sigma_{x,y,z}$ où on a

introduit les matrices de Pauli : $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$; $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$; $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

Ces matrices possèdent les propriétés de commutation et d'anticommutation suivantes, qui seront utiles dans la suite :

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk} \sigma_k \quad ; \quad \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} I.$$

En conclusion, l'électron dans l'atome est décrit par une fonction d'onde à deux composantes : $\psi = f(x, y, z) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, qui possède une partie spatiale et une partie interne. On appelle cette fonction un spineur à deux composantes.

Si $a=1$ et $b=0$, l'électron a son spin dirigé suivant \vec{u}_z ($S_z(\psi) = \frac{\hbar}{2}\psi$).

Si $a=0$ et $b=1$, l'électron a son spin dirigé suivant $-\vec{u}_z$ ($S_z(\psi) = -\frac{\hbar}{2}\psi$).

D - Motivations de Dirac

- *équation de continuité Schrödinger*
- *équation de continuité K-G*
- *problèmes de l'équation K-G :*
 - *probabilités négatives, énergies négatives, du second ordre en temps*

Même si les corrections de spin ajoutées aux corrections relativistes donnent un excellent accord avec les mesures, l'équation de Klein-Gordon a plusieurs défauts qui motivent Dirac à chercher une équation plus satisfaisante.

Premier problème : l'équation de K-G est du second ordre en temps, et la donnée de la fonction d'onde à l'instant initial ne permet pas de prédire son évolution, contrairement à l'équation de Schrödinger.

Second problème : l'équation de K-G a des solutions d'énergie négative.

En effet les ondes planes $\psi(\vec{r}, t) = N \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})\right]$ où N est un facteur de normalisation sont solutions pour $E = \pm\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$.

Troisième problème : l'équation de Klein-Gordon ne permet pas de définir une probabilité de présence positive !

Voyons cela de plus près.

Avec l'équation de Schrödinger, si on définit la densité de courant de probabilité (à partir d'ici, on utilise les unités naturelles : $\hbar = 1$; $c = 1$) :

$\vec{j} = \frac{1}{m} \text{Im}[\psi^* \vec{\nabla} \psi]$ et la densité de probabilité $\rho = \psi^* \psi$, on obtient l'équation de continuité (voir démonstration ci-dessous) :

$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0$, qui exprime la conservation de la probabilité totale de présence au

cours du temps ($\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = - \int_S \vec{j} \cdot \vec{dS} = 0$ si V est le volume total).

Notons que, pour une onde plane :

$$\vec{j} = \frac{1}{m} \text{Im}[\psi^* \vec{\nabla} \psi] = \frac{|N|^2}{m} \text{Im}(i \vec{p}) = |N|^2 \vec{v} = \rho \vec{v}.$$

Démonstration de l'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \underbrace{\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}}_X$$

$$X = \left(+\frac{1}{i} \frac{\Delta \psi^*}{2m} - \frac{V}{i} \psi^* \right) \psi + \psi^* \left(-\frac{1}{i} \frac{\Delta \psi}{2m} + \frac{V}{i} \psi \right) \text{ car : } \begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2mi} \Delta \psi + \frac{V}{i} \psi \\ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = +\frac{1}{2mi} \Delta \psi^* - \frac{V}{i} \psi^* \end{cases}$$

$$= \frac{1}{2mi} \left(\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \psi^*) \psi - \psi^* \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \psi) \right)$$

$$= \frac{1}{2mi} \vec{\nabla} \cdot (\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi) = \frac{1}{2mi} \vec{\nabla} \cdot (-2i \text{Im}[\psi^* \vec{\nabla} \psi]) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j} \text{ CQFD}$$

Avec l'équation de K-G, et pour rester compatible avec la relativité, il faut définir un quadrivecteur courant :

$$\text{Métrique (espace de Minkowski) : } g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$j^\mu = -\frac{1}{m} \text{Im}[\psi^* \partial^\mu \psi] \quad \text{avec} \quad j^0 = \rho ; j^1 = j_x ; j^2 = j_y ; j^3 = j_z$$

$$(\partial_\mu) = \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla} \right) ; \quad (\partial^\mu) = \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} \right) = (g^{\mu\nu} \partial_\nu) = \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right)$$

Avec cette définition, on obtient l'équation de continuité $\partial_\mu j^\mu = 0$ en utilisant l'équation de K-G.

Démonstration :

$$\text{K-G : } -\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + m^2 \psi \text{ soit : } \partial_\mu \partial^\mu \psi + m^2 \psi = 0$$

$$\text{Donc : } \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi) = \underbrace{\partial_\mu \psi^* \partial^\mu \psi}_{\text{réel}} - \underbrace{\psi^* m^2 \psi}_{\text{réel}}, \text{ donc } \partial_\mu j^\mu = 0, \text{ CQFD.}$$

Le problème, c'est que, pour une onde plane $\psi(\vec{r}, t) = N \exp[-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})]$, on obtient :

$$j^0 = \rho = -\frac{1}{m} \text{Im} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] = -\frac{|N|^2}{m} \text{Im}[-iE] = \frac{|N|^2}{m} E ,$$

et cette quantité est négative pour les solutions d'énergie négative $E = -\sqrt{p^2 + m^2}$.
Difficile de concevoir une densité de probabilité négative !

E - Établissement de l'équation de Dirac

- on sort du cadre
- nécessité des opérateurs α et β et d'une fonction d'onde à 4 composantes
- matrices α et β
- matrices γ
- équation de continuité, probabilités positives

Dirac cherche donc à écrire une équation du premier ordre par rapport au temps, et donc aussi par rapport aux variables d'espace à cause du principe de relativité :

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = (-i \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + m \beta) \psi,$$

où $\vec{\alpha}$ et β sont des paramètres constants à déterminer.

Il veut aussi qu'elle soit compatible avec la relation entre l'énergie et la quantité de mouvement et donc retrouver l'équation de Klein-Gordon en dérivant deux fois par rapport au temps :

$$-\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = (-i \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + m \beta)(-i \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + m \beta) \psi = (-\nabla^2 + m^2) \psi$$

Alors, en développant et en identifiant les termes à droite et à gauche, on obtient les conditions :

$$\begin{cases} \alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \beta^2 = 1 \\ \alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x = 0 \dots \text{etc} \dots \\ \alpha_x \beta + \beta \alpha_x = 0 \dots \text{etc} \dots \end{cases}$$

Les paramètres $\vec{\alpha}$ et β ne peuvent donc pas être des nombres ; il faut prendre des opérateurs linéaires, qu'on peut donc représenter par des matrices, qui agissent sur une fonction d'ondes à plusieurs composantes.

Propriétés de ces opérateurs déduites du système d'équations précédent :

- hermitiques car $(-i \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + m \beta)$ est le hamiltonien du système et doit donc être hermitique (noter que $-i \vec{\nabla} = \vec{p}$ est hermitique) ;
- de valeurs propres ± 1 car leur carré vaut l'identité ;
- de trace nulle car (on rappelle que $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$) :

$$\hat{\beta} \times (\hat{\alpha}_x \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_x = 0) \Rightarrow \hat{\beta} \hat{\alpha}_x \hat{\beta} = -\hat{\alpha}_x \Rightarrow \text{Tr}(\hat{\beta} \hat{\alpha}_x \hat{\beta}) = \text{Tr}(\hat{\alpha}_x) = -\text{Tr}(\hat{\alpha}_x) = 0$$

$$\hat{\beta} \times (\hat{\alpha}_x \hat{\alpha}_x = 1) \Rightarrow \hat{\beta} = -\hat{\alpha}_x \hat{\beta} \hat{\alpha}_x \Rightarrow \text{Tr}(\hat{\beta}) = -\text{Tr}(\hat{\beta}) = 0$$

- et donc d'après les deux propriétés précédentes, de dimension $2n \times 2n$.

Il n'y a pas de solution en dimension 2 ($n=1$), car deux matrices de carré égal à l'identité qui anti commutent sont indépendantes, or il n'y a que trois matrices hermitiques indépendantes en dimension 2 non égales à l'identité.

On peut facilement trouver une solution en dimension 4 en utilisant le fait que les matrices de Pauli ont des propriétés analogues :

$$\hat{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix} \text{ avec}$$

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

On voit donc qu'on est conduit à élargir l'espace représentant les états, ce n'est plus un espace de fonctions à valeurs complexes, mais un espace de fonctions à (au moins) 4 composantes complexes. Il reste à interpréter physiquement ces fonctions.

Pour alléger les notations, on notera dans la suite les opérateurs sans $\hat{\quad}$ quand il n'y a pas d'ambiguïté.

Notons qu'il est possible de trouver d'autres matrices solutions de ces équations.

En fait tout ensemble de 4 matrices construites à partir des matrices précédentes par une transformation $M \rightarrow UMU^\dagger$ où U est une matrice unitaire ($U^\dagger U = UU^\dagger = I$) vérifie le système de contraintes, comme on peut le voir très facilement.

Toutes ces solutions conduisent à des **représentations équivalentes** de la physique.

Il suffit de représenter le système physique initialement décrit par ψ par la nouvelle fonction d'onde $\psi' = U\psi$:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = (-i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + m\beta)\psi \Rightarrow i \frac{\partial U\psi}{\partial t} = (-iU\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + mU\beta)\psi$$

$$\Rightarrow i \frac{\partial U\psi}{\partial t} = (-iU\vec{\alpha}U^\dagger \cdot \vec{\nabla} + mU\beta U^\dagger)U\psi \Rightarrow i \frac{\partial \psi'}{\partial t} = (-i\vec{\alpha}' \cdot \vec{\nabla} + m\beta')\psi'$$

Réciproquement, tout système de matrices solutions du système s'obtient à partir d'une transformation définie plus haut (c'est un peu long à démontrer, et on admettra ce résultat).

Pour donner une forme plus symétrique entre les coordonnées spatiales et temporelle, on introduit les matrices γ^μ :

$\gamma^0 = \beta$; $\gamma^{1,2,3} = \beta \alpha_{x,y,z}$, soit dans la représentation dite standard :

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} ; \quad \gamma^{1,2,3} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{x,y,z} \\ -\sigma_{x,y,z} & 0 \end{pmatrix}$$

En multipliant l'équation de Dirac initiale par γ^0 et en utilisant le principe de correspondance, on obtient (on prend soin ici de distinguer l'opérateur (\widehat{p}_μ) du quadrivecteur (p_μ) :

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = (-i \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + m \beta) \psi \rightarrow (\gamma^\mu \widehat{p}_\mu - m) \psi = 0$$

Avec :

$$\gamma^\mu \widehat{p}_\mu = \gamma^0 \widehat{p}_0 - \vec{\gamma} \cdot \widehat{\vec{p}} ; \quad \widehat{p}_0 \iff i \frac{\partial}{\partial t} ; \quad \widehat{\vec{p}} \iff -i \vec{\nabla} \quad \text{soit} \quad \widehat{p}^\mu = i \partial^\mu$$

Remarque : il faudrait pour être complet expliciter comment se transforme ψ pour rendre l'équation de Dirac formellement invariante par transformation de Lorentz. Nous ne le ferons pas, cela est au-delà des objectifs de ces notes.

Les problèmes associés à l'équation de K-G sont-ils résolus ?

- le premier l'est par construction ;
- le troisième l'est aussi ! En effet, si on définit le quadrivecteur densité de courant par $j^\mu = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \psi$, on a : $\partial_\mu j^\mu = 0$

Démonstration :

$$\partial_\mu j^\mu = (\partial_\mu \psi^\dagger) \gamma^0 \gamma^\mu \psi + \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu (\partial_\mu \psi)$$

$$\text{Eq. Dirac : } i \gamma^\mu \partial_\mu \psi - m \psi = 0 \Rightarrow i \gamma^0 \gamma^\mu \partial_\mu \psi - m \gamma^0 \psi = 0$$

$$\Rightarrow -i \partial_\mu \psi^\dagger (\gamma^0 \gamma^\mu)^\dagger - m \psi^\dagger \gamma^{0\dagger} = 0$$

Or :

$$\begin{cases} \gamma^{0\dagger} = \beta^\dagger = \beta = \gamma^0 \\ (\gamma^0 \gamma^{1,2,3})^\dagger = (\beta^2 \alpha_{x,y,z})^\dagger = \alpha_{x,y,z} = \gamma^0 \gamma^{1,2,3} \end{cases}$$

$$\text{D'où : } \partial_\mu j^\mu = -\frac{m}{i} \psi^\dagger \gamma^0 \psi + \psi^\dagger \gamma^0 \frac{m}{i} \psi = 0 \text{ CQFD}$$

Et $j^0 = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \psi = \psi^\dagger \psi > 0$! On peut définir une densité de probabilité positive et conservée !

Remarque : il faudrait pour être complet montrer que j^μ est bien un quadrivecteur, et pour cela utiliser la loi de transformation de ψ par transformation de Lorentz, que nous n'avons pas vue.

- Qu'en est-il du second problème, l'existence de solutions d'énergies négatives ? Pour répondre à cette question, il faut trouver les solutions de l'équation de Dirac...

F - Solutions de l'équation de Dirac

- solutions à énergie positive et **solutions à énergie négative**
- représentations et transformation de Newton-Wigner
- opérateur position moyenne

Cherchons les solutions en ondes planes de l'équation de Dirac :

$$\psi(x^\mu) = \begin{pmatrix} u_1(p_\mu) \\ u_2(p_\mu) \\ u_3(p_\mu) \\ u_4(p_\mu) \end{pmatrix} \exp(-ip_\mu x^\mu)$$

On pose $\begin{pmatrix} u_1(p_\mu) \\ u_2(p_\mu) \\ u_3(p_\mu) \\ u_4(p_\mu) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_a \\ u_b \end{pmatrix}$ pour alléger les notations. On introduit ainsi deux

« spineurs » à deux composantes, u_a et u_b , et l'expression « spineurs » s'éclairera dans la suite du calcul.

Alors, en notant que $\widehat{p}_\mu [\exp(-ip_\mu x^\mu)] = p_\mu \exp(-ip_\mu x^\mu)$ où on a distingué l'opérateur quantité de mouvement de la quantité de mouvement elle-même, l'équation de Dirac devient :

$$(\gamma^\mu p_\mu - m) \begin{pmatrix} u_a \\ u_b \end{pmatrix} = 0$$

En utilisant les expressions des matrices γ , on obtient :

$$\begin{pmatrix} EI & -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -EI \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_a \\ u_b \end{pmatrix} = m \begin{pmatrix} u_a \\ u_b \end{pmatrix}$$

$$\text{D'où : } \begin{cases} (E - m)u_a = \vec{\sigma} \cdot \vec{p} u_b & (1) \\ (E + m)u_b = \vec{\sigma} \cdot \vec{p} u_a & (2) \end{cases} \Rightarrow (E^2 - m^2)u_{a,b} = (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 u_{a,b} = p^2 u_{a,b}$$

Pour la dernière égalité, on a utilisé l'identité :

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{X})(\vec{\sigma} \cdot \vec{Y}) = \vec{X} \cdot \vec{Y} I + i(\vec{X} \wedge \vec{Y}) \cdot \vec{\sigma}$$

Alors, on retrouve la relation relativiste :

$$E^2 = p^2 + m^2 \Rightarrow E = \pm \varepsilon \text{ avec } \varepsilon = \sqrt{p^2 + m^2} \geq m$$

Pour $E = +\varepsilon$, on peut diviser (2) par $(E + m)$, et pour tout u_a

$$\psi(x^\mu) = \begin{pmatrix} u_a \\ \left(\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{\varepsilon + m} \right) u_a \end{pmatrix} \exp(-ip_\mu x^\mu) \text{ est solution de l'équation de Dirac.}$$

Pour $E = -\varepsilon$, on peut diviser (1) par $(E - m)$, et pour tout u_b

$$\psi(x^\mu) = \begin{pmatrix} -\left(\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{\varepsilon + m} \right) u_b \\ u_b \end{pmatrix} \exp(-ip_\mu x^\mu) \text{ est solution de l'équation de Dirac.}$$

On trouve donc des solutions d'énergie négative ! Le troisième problème n'est pas résolu. Que faire de ces solutions ?

Les déclarer non physiques et s'en débarrasser ? C'est possible pour des particules libres, car il existe en effet, pour l'équation de Dirac libre, une représentation (représentation de Newton-Wigner) dans laquelle on peut écrire l'équation d'évolution en deux équations séparées décrivant l'évolution des solutions positives et négatives. Elle s'obtient comme un cas particulier de transformation de Foldy-Wouthuysen (1949) –voir paragraphe suivant. (Mal)heureusement, la séparation exacte des solutions ne fonctionne pas en présence d'un champ électromagnétique... On discutera au paragraphe I les autres interprétations de ces solutions.

G - Représentation de Newton-Wigner

On voudrait découpler les équations d'évolution des solutions d'énergie positive et des solutions d'énergie négative pour éliminer ces dernières.

Pour des particules libres, le hamiltonien de Dirac s'écrit : $H_D = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m$.

Considérons l'opérateur $U = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{\varepsilon + m}} \frac{1}{2} \left(1 + \beta \frac{H_D}{\varepsilon} \right)$ (avec $\varepsilon = \sqrt{p^2 + m^2}$).

$$U = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{\varepsilon + m}} \frac{1}{2\varepsilon} \left((\varepsilon + m)I + \beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \right)$$

$$U^\dagger = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{\varepsilon + m}} \frac{1}{2\varepsilon} \left((\varepsilon + m)I + \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \beta \right) \text{ car } \beta^2 = I, \vec{\alpha}^\dagger = \vec{\alpha} \text{ et } \beta^\dagger = \beta$$

$$U^\dagger U = \frac{1}{\varepsilon + m} \frac{1}{2\varepsilon} \left((\varepsilon + m)^2 I + (\varepsilon + m) \left(\underbrace{\vec{\alpha} \cdot \vec{p} \beta + \beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p}}_{0 \text{ car } \vec{\alpha}\beta + \beta\alpha = 0} \right) + (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} \beta \beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p}) \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\varepsilon + m} \frac{1}{2\varepsilon} \left((\varepsilon + m)^2 + p^2 \right) I \text{ car } \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij} I \\
&= \frac{1}{\varepsilon + m} \frac{1}{2\varepsilon} \left(\varepsilon^2 + 2\varepsilon m + m^2 + p^2 \right) I = I
\end{aligned}$$

De même on trouve $UU^\dagger = 1$, l'opérateur U est unitaire.

On change alors de représentation des solutions en posant $\Phi = U\psi$.

$$\text{Si } i \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_D \psi \text{ alors } i \frac{\partial \Phi}{\partial t} = i \frac{\partial (U\psi)}{\partial t} = UH_D \psi = (UH_D U^\dagger)(U\psi) \equiv H_{NW} \Phi .$$

Calculons H_{NW} :

$$\begin{aligned}
H_{NW} &= UH_D U^\dagger \\
&= \sqrt{\frac{2\varepsilon}{\varepsilon + m}} \frac{1}{2\varepsilon} \left((\varepsilon + m)I + \beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \right) \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m \right) \sqrt{\frac{2\varepsilon}{\varepsilon + m}} \frac{1}{2\varepsilon} \left((\varepsilon + m)I + \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \beta \right) \\
&= \frac{1}{\varepsilon + m} \frac{1}{2\varepsilon} \left((\varepsilon + m)I + \beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \right) \underbrace{\left(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m \right) \left((\varepsilon + m)I + \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \beta \right)}_X
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
X &= (\varepsilon + m) \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + p^2 \beta + m(\varepsilon + m) \beta + m \beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \beta \\
&= (\varepsilon + m) \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + p^2 \beta + m(\varepsilon + m) \beta - m \vec{\alpha} \cdot \vec{p}
\end{aligned}$$

Donc :

$$\begin{aligned}
H_{NW} &= \frac{1}{\varepsilon + m} \frac{1}{2\varepsilon} \left((\varepsilon + m)I + \beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \right) \left((\varepsilon + m) \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + p^2 \beta + m(\varepsilon + m) \beta - m \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \right) \\
&= \frac{1}{\varepsilon + m} \frac{1}{2\varepsilon} \left(\begin{aligned} &(\varepsilon + m)^2 \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + (\varepsilon + m) p^2 \beta + m(\varepsilon + m)^2 \beta - m(\varepsilon + m) \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \\ &+ (\varepsilon + m) p^2 \beta - p^2 \vec{\alpha} \cdot \vec{p} - m(\varepsilon + m) \vec{\alpha} \cdot \vec{p} - m p^2 \beta \end{aligned} \right) \\
&= \frac{1}{\varepsilon + m} \frac{1}{2\varepsilon} \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} \left((\varepsilon + m)^2 - 2m(\varepsilon + m) - p^2 \right) + \beta \left(2(\varepsilon + m) p^2 + m(\varepsilon + m)^2 - m p^2 \right) \right) \\
&= \frac{1}{\varepsilon + m} \frac{1}{2\varepsilon} \left(\beta \left(2\varepsilon p^2 + 2m p^2 + m\varepsilon^2 + m^3 + 2\varepsilon m^2 - m p^2 \right) \right) = \varepsilon \beta
\end{aligned}$$

Finalement :

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \varepsilon \beta \Phi \Leftrightarrow \begin{cases} i \frac{\partial \Phi_a}{\partial t} = +\varepsilon \Phi_a \\ i \frac{\partial \Phi_b}{\partial t} = -\varepsilon \Phi_b \end{cases} \text{ en posant : } \Phi = \begin{pmatrix} \Phi_a \\ \Phi_b \end{pmatrix}$$

On a découplé les solutions d'énergie positive et négative dans cette représentation.

Remarque : attention, les opérateurs dans la représentation de NW changent a priori, mais \vec{p} (et \vec{J}) commutent avec U , et restent donc inchangés. Ce n'est pas le cas de l'opérateur position : cet opérateur devient un opérateur de position moyenne.

Opérateur position moyenne

L'opération $\vec{r}_{NW} \Phi$ dans la représentation de NW donne la position \vec{r} multipliée par la moyenne de ψ sur une distance de l'ordre de la longueur d'onde de Compton de la particule.

Montrons-le :

Par transformation inverse, cet opérateur représente l'opérateur \vec{R} dans la représentation de Dirac, défini par :

$$\vec{R} = U^\dagger \vec{r}_{NW} U \Leftrightarrow U \vec{R} U^\dagger = \vec{r}_{NW}.$$

$$\text{Or } \langle \vec{r} | U | \vec{r}' \rangle = \iint \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle d\vec{p} \langle \vec{p} | U | \vec{p}' \rangle d\vec{p}' \langle \vec{p}' | \vec{r}' \rangle \text{ et } \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}).$$

De plus : $\langle \vec{p} | U | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \langle \vec{p} | U | \vec{p} \rangle$ car U commute avec \hat{p} :

$$\langle \vec{p} | U \hat{p} | \vec{p}' \rangle = \vec{p}' \langle \vec{p} | U | \vec{p}' \rangle = \langle \vec{p} | \hat{p} U | \vec{p}' \rangle = \vec{p} \langle \vec{p} | U | \vec{p}' \rangle \Rightarrow \langle \vec{p} | U | \vec{p}' \rangle = 0 \text{ si } \vec{p} \neq \vec{p}' .$$

$$\Rightarrow \langle \vec{r} | U | \vec{r}' \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int U(\vec{p}) \exp(i\vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')) d\vec{p}$$

$$\Rightarrow \langle \vec{r} | U | \vec{r}' \rangle \approx 0 \text{ si } |\vec{r} - \vec{r}'| \gg 1/m.$$

Ainsi, la transformation de Newton-Wigner est une transformation non locale dans laquelle le spineur transformé $\psi'(\vec{r})$ s'obtient à partir du spineur initial par une sorte de moyenne de $\psi(\vec{r})$ sur un volume de dimension linéaire de l'ordre de la longueur d'onde de Compton de la particule, \hbar/mc :

$$\psi'(\vec{r}) = \langle \vec{r} | U | \psi \rangle = \int \langle \vec{r} | U | \vec{r}' \rangle d\vec{r}' \langle \vec{r}' | \psi \rangle$$

L'action de l'opérateur \vec{R} , dans la représentation de Dirac, sur un spineur consiste à multiplier par \vec{r} en remplaçant $\psi(\vec{r})$ par une certaine moyenne du spineur dans un domaine de l'ordre de \hbar/mc entourant le point. C'est ce qui était annoncé en début de paragraphe.

H - Équation de Dirac en présence d'un champ électromagnétique

- Lagrangien des forces de Lorentz
- impulsion et quantité de mouvement

- relations de commutation et principe de correspondance pour l'impulsion
- hamiltonien en présence d'un champ électromagnétique
- approximation non relativiste
- solution à énergie positive :
spin de l'électron et facteur de Landé g

Impulsion et quantité de mouvement

Par définition, on appelle impulsion le moment conjugué de la position dans le formalisme lagrangien : $p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j}$. Dans ce formalisme, les équations du

mouvement s'écrivent $\frac{dp_j}{dt} = \frac{\partial L}{\partial x_j}$.

- Exemple simple : particule non relativiste dans un potentiel dépendant de \vec{x} :

$$L(\vec{x}, \vec{v}) = \frac{1}{2} m v^2 - V(\vec{x}) \Rightarrow \vec{p} = m \vec{v}$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial x_i} \Leftrightarrow \frac{d(m\vec{v})}{dt} = -\vec{\nabla} V$$

- Le lagrangien qui permet de retrouver les forces de Lorentz pour une particule chargée relativiste s'écrit :

$$\text{Force de Lorentz : } \vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) = \frac{d(\gamma m \vec{v})}{dt}$$

$$\text{Rappel : } \begin{cases} \vec{E} = -\vec{\nabla} V - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \\ \vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A} \end{cases}$$

Lagrangien correspondant :

$$L = -m\sqrt{1-v^2} + q\vec{v} \cdot \vec{A} - qV$$

$$\vec{p} \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v}} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-v^2}} + q\vec{A}$$

$$H = \vec{v} \cdot \vec{p} - L = m \frac{v^2}{\sqrt{1-v^2}} + m\sqrt{1-v^2} + qV = \sqrt{m^2 + (\vec{p} - q\vec{A})^2} + qV$$

Démonstration :

Équation du mouvement : $\frac{\partial L}{\partial \vec{x}} = \frac{d\vec{p}}{dt}$. Exemple : projection sur l'axe x

$$q \left[v_x \frac{\partial A_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial A_y}{\partial x} + v_z \frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \right] = \frac{d(\gamma m v_x)}{dt} + q \left[\frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial A_x}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial A_x}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} \right]$$

$$\text{soit : } q \left[\underbrace{-\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t}}_{E_x} + v_y \left(\underbrace{\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}}_{B_z} \right) + v_z \left(\underbrace{\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z}}_{-B_y} \right) - \frac{\partial V}{\partial x} \right] = \frac{d(\gamma m v_x)}{dt}$$

$$\text{d'où finalement : } \frac{d(\gamma m v_x)}{dt} = q \left[E_x + [\vec{v} \wedge \vec{B}]_x \right]$$

On voit donc qu'en présence d'un champ électromagnétique, l'impulsion n'est plus égale à la quantité de mouvement mais on a : $\vec{p} = \vec{\pi} + q\vec{A}$, où on a noté $\vec{\pi}$ la quantité de mouvement.

Principe de correspondance

Le principe de correspondance de la mécanique quantique s'applique à l'énergie et à l'impulsion, ceci afin que les équations d'évolution de la mécanique quantique redonnent la mécanique classique à la limite $\hbar \rightarrow 0$.

En présence d'un champ électromagnétique, on a donc :

- Cas non relativiste : $E = \frac{1}{2}mv^2 + qV \Leftrightarrow i \frac{\partial}{\partial t}$; $\vec{p} = \underbrace{\vec{\pi}}_{mv} + q\vec{A} \Leftrightarrow -i\vec{\nabla}$
- Cas relativiste : $E = \gamma m + qV \Leftrightarrow i \frac{\partial}{\partial t}$; $\vec{p} = \underbrace{\vec{\pi}}_{\gamma m \vec{v}} + q\vec{A} \Leftrightarrow -i\vec{\nabla}$

On note ici la quantité de mouvement $\vec{\pi}$ et c'est l'impulsion qui est notée \vec{p} .

Ainsi, l'équation de Schrödinger devient, puisque $E_c = \frac{\pi^2}{2m} = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} = E - qV$:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{(-i\vec{\nabla} - q\vec{A})^2}{2m} + qV \right) \psi$$

L'équation de Dirac devient (rappel : p_μ est l'opérateur $i\partial_\mu$) :

$$\gamma^\mu (i\partial_\mu - qA_\mu) \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = m \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix}$$

Attention, on a noté la fonction d'onde à 4 composantes $\begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix}$ et non

$\begin{pmatrix} u_a \\ u_b \end{pmatrix} \exp(ip_\mu x^\mu)$ car une onde plane libre n'est plus a priori solution ; ψ_a et ψ_b ont a priori une dépendance en x^μ hors de l'exponentielle à cause de la présence de A_μ dans l'équation, et donc $\widehat{p}_\mu \psi \neq p_\mu \psi$.

On se souvient que $(A^\mu) = (V, \vec{A})$; $(A_\mu) = (V, -\vec{A})$

$$\begin{pmatrix} (E - qV)I & -\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - q\vec{A}) \\ \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - q\vec{A}) & -(E - qV)I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = m \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix}$$

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

$$\gamma^\mu p_\mu = \gamma^0 E - \vec{\gamma} \vec{p}$$

$$\begin{cases} E\psi_a = \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - q\vec{A})\psi_b + (qV + m)\psi_a & (1) \end{cases}$$

$$\begin{cases} E\psi_b = \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - q\vec{A})\psi_a + (qV - m)\psi_b & (2) \end{cases}$$

Limite non relativiste pour $E > 0$:

$$E - m, qV, |q\vec{A}|, |\vec{\pi}| \ll m$$

$$(2) \Rightarrow \psi_b = \frac{\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - q\vec{A})\psi_a}{E + m + o(m)} \Rightarrow (1) \quad (E - m)\psi_a = \left(\frac{(\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - q\vec{A}))^2}{E + m} + qV \right) \psi_a$$

$$\text{Or : } (\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - q\vec{A}))^2 = (\vec{p} - q\vec{A})^2 + i((\vec{p} - q\vec{A}) \wedge (\vec{p} - q\vec{A})) \cdot \vec{\sigma}$$

$$= (\vec{p} - q\vec{A})^2 - q(\vec{\nabla} \wedge \vec{A}) \cdot \vec{\sigma} = (\vec{p} - q\vec{A})^2 - q\vec{B} \cdot \vec{\sigma}$$

On a utilisé pour le dernier terme le calcul (\vec{p} est l'opérateur $-i\vec{\nabla}$!):

$$(\vec{p} - q\vec{A}) \wedge (\vec{p} - q\vec{A}) = -(\vec{p} \wedge q\vec{A} + q\vec{A} \wedge \vec{p}) = iq(\vec{\nabla} \wedge \vec{A}) = iq\vec{B}$$

Valeurs propres de l'énergie :

$$(E - m)\psi_a = \left(\frac{|\vec{\pi}|^2 - q\vec{B} \cdot \vec{\sigma}}{E + m + o(m)} + qV \right) \psi_a$$

$$E - m = o(m) \Rightarrow E + m = 2m + o(m)$$

$$\Rightarrow (E - m) = \underbrace{\frac{\pi^2}{2m} + qV}_{Ec + Ep} - \underbrace{\frac{q\vec{B} \cdot \vec{\sigma}}{2m}}_{\text{nouveau terme égal à l'énergie de Pauli}}$$

$$\text{Rappel : terme de Pauli } -\frac{gq}{2m} \vec{S} \cdot \vec{B} \text{ avec } \begin{cases} g = 2 \\ \vec{S} = \hbar \vec{\sigma} / 2 \\ \hbar = 1 \end{cases} \Rightarrow -q \frac{\vec{B} \cdot \vec{\sigma}}{2m} \text{ CQFD}$$

Ainsi, ψ_a représente le spineur à deux composantes de l'équation de Pauli !

Remarque : on peut négliger la seconde composante car $|\psi_b / \psi_a| \sim p / m \ll 1$ par hypothèse.

On a donc, grâce à l'approximation non relativiste, découplé les équations d'évolution des solutions à énergie positive et à énergie négative.

La première équation redonne l'équation de Pauli pour ψ_a à la limite non relativiste.

C'est un résultat remarquable et un succès majeur de l'équation de Dirac, qui prédit ainsi l'existence du spin de l'électron et le facteur de Landé, qui avaient dû être ajoutés « à la main » pour rendre compte des résultats expérimentaux.

Il y a cependant les solutions à énergie négative : $E \simeq -m - o(m)$. Pour ψ_b , on trouve alors : $E\psi_b = (-m - o(m))\psi_b$ en négligeant les autres termes. Un spineur à deux composantes d'énergie négative : une particule qui aurait une masse inertielle négative, qui s'approcherait d'autant plus qu'on exerce une force répulsive sur elle ! Que faire de telles solutions !?

Regardons de plus près cette solution dans la limite non relativiste. On a $E = -\varepsilon$ avec $\varepsilon - m, qV, |q\vec{A}|, |\vec{\pi}| \ll m$. En utilisant la même démarche que précédemment mais en échangeant le rôle des deux équations, on obtient :

$$\begin{cases} E\psi_a = \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - q\vec{A})\psi_b + (qV + m)\psi_a & (1) \end{cases}$$

$$\begin{cases} E\psi_b = \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - q\vec{A})\psi_a + (qV - m)\psi_b & (2) \end{cases}$$

$$(1) \Rightarrow \psi_a = \frac{\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - q\vec{A})\psi_b}{-\varepsilon - m + o(m)} \Rightarrow (2) \quad (-\varepsilon + m)\psi_b = \left(\frac{(\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - q\vec{A}))^2}{-\varepsilon - m} + qV \right) \psi_b$$

Soit, en changeant les signes des deux membres de l'équation :

$$(\varepsilon - m)\psi_b = \left(\frac{|\vec{\pi}|^2 - q\vec{B} \cdot \vec{\sigma}}{\varepsilon + m} - qV \right) \psi_b$$

$$\Rightarrow (\varepsilon - m) = \frac{\pi^2}{2m} - qV + \frac{q\vec{B} \cdot \vec{\sigma}}{2m}$$

Les deux derniers termes sont exactement les termes d'interaction pour une particule de masse m et de charge $-q$. Si on pouvait donner l'énergie ε à cette solution, elle se comporterait comme un électron de charge positive...

I - Interprétation des solutions à énergie négative

i. *Mer de Dirac*

ii. *conjugaison de charge, masse et charge du positron*

- Peut-on les rejeter purement et simplement comme étant non physique ? C'est possible pour des particules sans interaction, mais comme on l'a dit plus haut dans le paragraphe sur la transformation de Foldy-Wouthuysen, on ne peut pas trouver de représentation qui découple rigoureusement les deux spineurs en présence d'un champ, et on ne peut donc pas les éliminer purement et simplement.
- Théorie des trous de Dirac : dans un premier temps, Dirac a imaginé une interprétation dans laquelle le vide correspond à une situation où tous les niveaux d'énergie négative sont occupés par les électrons. Si on ajoute un électron, il a alors nécessairement une énergie positive grâce au principe de Pauli. Le vide est donc un gaz de Fermi complètement dégénéré, et non observable : les seules quantités observables sont les déviations par rapport à cet état. Si maintenant on retire un électron d'énergie négative, le « trou » ainsi créé apparaît comme une particule de charge opposée, d'énergie opposée, donc positive, et d'impulsion opposée. À l'époque, seules deux particules étaient connues : l'électron et le proton. Pendant quelque temps, on a pu croire que les trous étaient les protons, et que la différence de masse entre protons et électrons était due à la difficulté du trou de se déplacer dans la mer d'électrons d'énergie négative. Cette théorie a été rapidement abandonnée après calcul.
- En 1931, Dirac émet alors l'hypothèse de l'existence d'un anti-électron, qui serait l'effet observable d'un trou dans la mer d'électrons d'énergie négative. Avec cette théorie, on peut alors comprendre la création de paires et l'annihilation électron-positron par l'éjection d'un électron de la mer. C'était une hypothèse très difficile à proposer immédiatement, dans un contexte où seules deux particules semblaient suffire pour décrire la matière : l'électron et le proton ! Le neutron ne sera découvert qu'en 1932 ! Dans le

même papier (en fait surtout consacré au lien entre monopole magnétique et quantification de la charge électrique), Dirac émet aussi l'hypothèse qu'il devrait exister des anti-protons.

Un an plus tard, Anderson découvrait à Caltech, indépendamment, une particule de même masse que l'électron, mais de charge opposée. Une fois cette découverte confirmée par un autre groupe (Blackett et Occhialini à Cambridge), l'hypothèse de Dirac est enfin acceptée.

On verra au paragraphe suivant comment interpréter les solutions d'énergie négative dans ce cadre.

Malgré cela, cette théorie reste très insatisfaisante : rôle dissymétrique entre électrons et positrons, la théorie est en fait une théorie à plusieurs particules à cause des processus de création et d'annihilation, difficulté de définir les états d'énergie négative en présence d'un champ électromagnétique, paradoxe de Klein, problème des particules qui sont des bosons (comme les pions) qui ne sont pas soumis au principe de Pauli et ne peuvent donc pas saturer une mer d'états d'énergie négative.

J - Conjugaison de charge, masse et charge du positron

Nous montrons dans ce paragraphe comment les solutions d'énergie négative peuvent effectivement s'interpréter comme des positrons.

On va voir qu'en appliquant la transformation $\psi(E, \vec{p}) \rightarrow \psi^c = i\gamma^2 \psi^*(E, -\vec{p})$, la solution d'énergie négative vérifie, à la limite non relativiste, l'équation de Pauli d'une particule de même masse m , de même spin $1/2$, mais de charge opposée : ce sont toutes les propriétés de la particule qu'a trouvée Anderson, et qu'il a nommée positron.

Supposons que :

$$\psi = \begin{pmatrix} u_a \\ u_b \end{pmatrix} \exp(-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})) \text{ vérifie :}$$

$$\gamma^\mu (i\partial_\mu - qA_\mu) \psi = m\psi$$

Alors :

$$\gamma^\mu * (-i\partial_\mu - qA_\mu) \psi^* = m\psi^*$$

$$\gamma^2 \gamma^\mu * (-i\partial_\mu - qA_\mu) \psi^* = m\gamma^2 \psi^*$$

Or :

$$\gamma^2 \gamma^0 * = \gamma^2 \gamma^0 = -\gamma^0 \gamma^2$$

$$\gamma^2 \gamma^1 * = \gamma^2 \gamma^1 = -\gamma^1 \gamma^2$$

$$\gamma^2 \gamma^2 * = -\gamma^2 \gamma^2$$

$$\gamma^2 \gamma^3 = \gamma^2 \gamma^3 = -\gamma^3 \gamma^2$$

$$\text{Donc : } \gamma^2 \gamma^{\mu*} = -\gamma^{\mu} \gamma^2$$

$$\Rightarrow \gamma^{\mu} (i\partial_{\mu} + qA_{\mu}) (i\gamma^2 \psi^*) = m (i\gamma^2 \psi^*)$$

$$\text{Or : } i\gamma^2 \psi^* = \begin{pmatrix} i\sigma_2 u_b^* \\ -i\sigma_2 u_a^* \end{pmatrix} \exp(i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x}))$$

Intéressons-nous à présent à la solution d'énergie négative dans la limite non relativiste. Dans ce cas, $|u_a| \ll |u_b|$.

Si $E < 0$, $E = -\varepsilon$, et la fonction $i\gamma^2 \psi^*(E, -\vec{p}) = \begin{pmatrix} i\sigma_2 u_b^* \\ -i\sigma_2 u_a^* \end{pmatrix} \exp(-i(\varepsilon t - \vec{p} \cdot \vec{x}))$ vérifie,

comme on vient de le voir, la même équation qu'une particule d'énergie ε , d'impulsion \vec{p} , de masse $+m$ et de charge $-q$.

À la limite non relativiste, elle représente donc un spineur de positron qui vérifie l'équation de Pauli :

$$(\varepsilon - m)(i\sigma_2 u_b^*) = \left(\frac{\pi^2}{2m} - qV + \frac{q\vec{B} \cdot \vec{\sigma}}{2m} \right) (i\sigma_2 u_b^*)$$

K - Paradoxe de Klein

- i. barrière de potentiel Schrödinger
- ii. Paradoxe de Klein

On donne dans ce paragraphe un exemple des surprises qu'apporte l'équation de Dirac : un flux de particules peut pénétrer une barrière de potentiel (supérieure à son énergie initiale) sans extinction exponentielle à grande distance.

On commence par rappeler le traitement de cette situation en mécanique quantique. Pour simplifier, on considère des problèmes à une dimension d'espace (particule se déplaçant sur un axe Oz).

- i. Barrière de potentiel en mécanique quantique non relativiste

Rappel : solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger pour une particule d'énergie E dans un potentiel constant :

$$\psi(z, t) = \exp(-iEt) \varphi(z)$$

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + V\psi \Rightarrow E\varphi = -\frac{\varphi''}{2m} + V\varphi$$

$$\text{si } E > V : \varphi = a_1 \exp(ipz) + a_2 \exp(-ipz) \quad \text{avec} \quad p = \sqrt{2m(E - V)}$$

$$\text{si } E < V : \varphi = a_1 \exp(-kz) + a_2 \exp(kz) \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{2m(V - E)}$$

$$\text{ou} \quad : \varphi = a_1 \exp(iqz) + a_2 \exp(-iqz) \quad \text{avec} \quad q = i\sqrt{2m(E - V)} = \sqrt{2m(V - E)}$$

On cherche à présent à décrire une situation où une onde plane stationnaire se propageant vers les z positifs rencontre une barrière de potentiel à la position $z=0$ (potentiel nul pour les z négatifs, égal à $V > 0$ pour les z positifs), et on suppose qu'il n'y a pas d'onde se propageant vers les z négatifs dans la région $z > 0$. On a donc :

$$\psi(z, t) = \exp(-iEt) \varphi(z), \text{ avec :}$$

$$\text{pour } z < 0 \quad ; \quad \varphi(z) = a_1 \exp(ipz) + a_2 \exp(-ipz) \quad \text{avec} \quad p = \sqrt{2mE}$$

$$\text{pour } z > 0 \quad ; \quad \varphi(z) = b_1 \exp(iqz) \quad \text{avec} \quad q > 0 \text{ ou imaginaire pur} \quad \left(q = \sqrt{2m(V - E)} \right)$$

La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $z=0$ impose :

$$a_1 + a_2 = b_1$$

$$p(a_1 - a_2) = qb_1$$

On définit les coefficients de réflexion et de transmission par :

$$R = \left| \frac{a_2}{a_1} \right|^2 \quad ; \quad T = \frac{q}{p} \left| \frac{b_1}{a_1} \right|^2$$

Justification : courant de particules (à un facteur de normalisation près) :

$$\vec{j} = \frac{1}{m} \text{Im} \left[\psi^* \vec{\nabla} \psi \right]$$

$$j_z = \frac{1}{m} \text{Im} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial z} \right] = \frac{1}{m} \text{Im} \left[\varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right]$$

Pour $z < 0$:

$$j_z = \frac{1}{m} \text{Im} \left[\left(a_1^* \exp(-ipz) + a_2^* \exp(ipz) \right) i p \left(a_1 \exp(ipz) - a_2 \exp(-ipz) \right) \right]$$

$$= \frac{p}{m} \text{Im} \left[i \left(|a_1|^2 - |a_2|^2 - \underbrace{a_1^* a_2 \exp(-2ipz) + a_2^* a_1 \exp(2ipz)}_{\text{imaginaire pur}} \right) \right] = \frac{p}{m} (|a_1|^2 - |a_2|^2)$$

R est donc bien le rapport des courants réfléchi et incident.

Pour $z > 0$:

$$j_z = \frac{q}{m} |b_1|^2 \quad \text{si } q \text{ est réel.}$$

$$j_z = 0 \quad \text{si } q \text{ est imaginaire pur.}$$

T est donc bien le rapport des courants transmis et incident.

On obtient :

$$\text{si } E > V : R = \left(\frac{p-q}{p+q} \right)^2 ; \quad T = \frac{4pq}{(p+q)^2} ; \quad R+T=1$$

$$\text{si } E < V : R = \left(\frac{p+iq}{p-iq} \right)^2 = 1 ; \quad T = 0 ; \quad R+T=1$$

ii. Paradoxe de Klein : barrière de potentiel avec l'équation de Dirac

Choisissons pour l'étude une fonction d'onde solution de l'équation de Dirac stationnaire incidente dans la région $z < 0$, par exemple :

$$\psi = N \begin{pmatrix} \Phi \\ \frac{p}{\varepsilon+m} \Phi \end{pmatrix} \exp(ipz) \text{ avec : } \begin{cases} N \text{ facteur de normalisation} \\ \Phi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ p = \sqrt{\varepsilon^2 - m^2} > 0 \end{cases}$$

On cherche comme précédemment la solution stationnaire en présence d'une barrière de potentiel.

A) Cas $\varepsilon - V \geq m$

Région $z < 0$:

$$\psi = N \left[\begin{pmatrix} \Phi \\ \frac{p}{\varepsilon+m} \Phi \end{pmatrix} \exp(ipz) + a \begin{pmatrix} \Phi \\ \frac{-p}{\varepsilon+m} \Phi \end{pmatrix} \exp(-ipz) \right]$$

Région $z > 0$:

$$\psi = bN' \begin{pmatrix} \Phi \\ \frac{q}{\varepsilon-V+m} \Phi \end{pmatrix} \exp(iqz) \text{ avec } q = \sqrt{(\varepsilon-V)^2 - m^2}$$

La continuité de la fonction d'onde (pas de sa dérivée car l'équation de Dirac est du premier ordre) en $z=0$ donne :

$$\begin{cases} N(1+a) = bN' \\ N \frac{p}{\varepsilon+m} (1-a) = \frac{bq}{\varepsilon-V+m} N' \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{1-a}{1+a} = \frac{q}{p} \frac{\varepsilon+m}{\varepsilon-V+m} \equiv X \Rightarrow a = \frac{1-X}{1+X} \\ \frac{bN'}{N} = \frac{2}{1+X} \end{cases}$$

Courant de particules :

$$j_z = j^3 = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^3 \psi = |N|^2 \left(\Phi^\dagger, \frac{p}{\varepsilon + m} \Phi^\dagger \right) \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ -\sigma_z & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi \\ \frac{p}{\varepsilon + m} \Phi \end{pmatrix} = \frac{2p}{\varepsilon + m} |N|^2$$

$$\Rightarrow \begin{cases} R = |a|^2 = \left(\frac{1-X}{1+X} \right)^2 \\ T = |b|^2 \frac{2q|N|^2}{(\varepsilon - V + m)} \frac{(\varepsilon + m)}{2p|N|^2} = \frac{4X}{(1+X)^2} \end{cases}$$

On a $R+T=1$ comme il se doit.

B) Cas $-m < \varepsilon - V < 0$

Il n'y a pas d'onde propagée a priori et q est imaginaire pur.

Calculons le courant de particule :

$$j^3 = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^3 \psi = |N|^2 \left(\Phi^\dagger, \frac{\overline{q}}{\varepsilon - V + m} \Phi^\dagger \right) \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ -\sigma_z & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi \\ \frac{q}{\varepsilon - V + m} \Phi \end{pmatrix} = 0$$

C) Cas $\varepsilon - V < -m \Leftrightarrow V > \varepsilon + m$

$$\text{Alors } q = \pm \sqrt{(\varepsilon - V)^2 - m^2} \text{ et } j^3 = \frac{2q}{\varepsilon - V + m} |N|^2$$

Pour avoir $j^3 > 0$ (on ne veut pas de particule venant de $z > 0$), il faut prendre $q < 0$ car $\varepsilon - V + m < 0$!

Alors les formules pour R et T sont les mêmes que celles du cas A). Noter que

$$X \equiv \frac{q}{p} \frac{\varepsilon + m}{\varepsilon - V + m} \text{ est positif car } \varepsilon - V + m < 0.$$

Alors, où est le paradoxe ?

Si on fait tendre V vers l'infini, on obtient un coefficient de transmission qui tend vers une limite non nulle ! En effet $q \sim V$ quand $V \rightarrow \infty$, donc :

$$R \sim \frac{\varepsilon + m - p}{\varepsilon + m + p} \quad ; \quad T \sim \frac{4p(\varepsilon + m)}{(\varepsilon + m + p)^2}$$

Une particule semble pouvoir passer une barrière de potentiel répulsive sans la décroissance exponentielle dans la longueur de pénétration qu'on trouve avec l'équation de Schrödinger !

Ce paradoxe ne peut être correctement levé que dans le cadre de la théorie des champs, qui incorpore la création et l'annihilation de particules. En présence d'une énergie potentielle supérieure à $2m$ (ce qui est le cas puisque $\varepsilon > m$), il y a une émission possible de paires particule-antiparticule !

L - Zitterbewegung

- i. représentation de Heisenberg
- ii. équation du mouvement

On montre dans ce paragraphe que le mouvement d'une particule libre décrit par l'équation de Dirac est la superposition d'un mouvement de translation uniforme et d'un mouvement oscillatoire dont l'amplitude est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de Compton de l'électron.

i. Représentation de Heisenberg

On part de : $i \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$, et on pose $\psi(t) = U(t, t_0)\psi(t_0)$.

Alors $U(t, t_0) = \exp(-iH(t - t_0))$ (et donc $U^\dagger U = U U^\dagger = 1$), ou encore :

$$U(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t H U(t', t_0) dt.$$

On définit la représentation de Heisenberg en posant :

$$\psi_H(t) = U^\dagger(t, t_0)\psi(t) = \psi(t_0)$$

ψ_H est « immobile » (indépendant du temps).

Dans cette représentation, une observable A se transforme par :

$$A \rightarrow A_H = U^\dagger A U$$

Et de cette façon on a $\langle \psi_H | A_H | \psi_H \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$: la physique est la même.

Les ψ_H et A_H forment une nouvelle représentation du système physique, ce sont les opérateurs qui varient avec le temps, et pas la fonction d'onde.

Équation d'évolution des opérateurs :

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = i \frac{\partial U \psi(t_0)}{\partial t} = H U \psi(t_0) \Rightarrow \begin{cases} i \frac{\partial U}{\partial t} = H U \\ -i \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = U^\dagger H^\dagger = U^\dagger H \end{cases}$$

On en déduit :

$$i \frac{\partial A_H}{\partial t} = i \left(\frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A U + U^\dagger \frac{\partial A}{\partial t} U + U^\dagger A \frac{\partial U}{\partial t} \right) = -U^\dagger H A U + i \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_H + U^\dagger A H U$$

$$= U^\dagger [A, H] U + i \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_H = \left[A_H, \underbrace{H_H}_{=H} \right] + i \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_H$$

Si A ne dépend pas explicitement du temps ($\frac{\partial A}{\partial t} = 0$), on obtient : $\boxed{\frac{\partial A_H}{\partial t} = i[H, A_H]}$.

ii. Zitterbewegung

On repart du hamiltonien de Dirac d'une particule libre trouvé initialement :

$$H = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m$$

Comme l'opérateur \vec{p} commute avec H : $\vec{p}_H = \vec{p} = \text{constante}$.

$$\text{On a : } [x_H, p_{xH}] = U^\dagger [x, p_x] U = i U^\dagger U = i = [x, p_x]$$

Donc :

$$\frac{d\vec{r}_H}{dt} = i [H_H, \vec{r}_H] = \vec{\alpha}_H$$

$$\frac{d\vec{\alpha}_H}{dt} = i [H_H, \vec{\alpha}_H] = i U^\dagger [H, \vec{\alpha}] U$$

$$= U^\dagger \left(i (H \vec{\alpha} + \vec{\alpha} H) - 2i \vec{\alpha} H \right) U = 2i \vec{p} - 2i \vec{\alpha}_H H = - \left(\vec{\alpha}_H - \frac{\vec{p}}{\underbrace{H}_{H^{-1}}} \right) 2iH$$

$$\Rightarrow \vec{\alpha}_H = \left(\vec{\alpha}_H(0) - \frac{\vec{p}}{H} \right) \exp(-2iHt) + \frac{\vec{p}}{H}$$

$$\Rightarrow \vec{r}_H = \vec{r}_H(0) + \frac{\vec{p}}{H} t + \left(\vec{\alpha}_H(0) - \frac{\vec{p}}{H} \right) \frac{i}{2H} \exp(-2iHt - I)$$

Les deux premiers termes représentent une translation à vitesse constante, mais le troisième terme est un terme nouveau.

C'est un terme oscillant (d'où l'expression « Zitterbewegung » qui signifie tremblement). L'amplitude d'oscillation est de l'ordre de $\frac{1}{m}$, soit en rétablissant les

unités standard $\frac{\hbar}{mc}$, la longueur d'onde de Compton de l'électron.

Le calcul donne :

- Si on prend $\psi_H = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \exp(ipz)$, alors :

$$\langle \psi_H | \vec{r}_H | \psi_H \rangle = z_0 + \frac{mp_z t}{m^2 + pz^2} - \frac{mp_z \sin \left[2\sqrt{m^2 + p_z^2} t \right]}{2(m^2 + pz^2)^{3/2}}$$

- Si on prend $\psi = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ p \\ \mathcal{E} + m \\ 0 \end{pmatrix} \exp(ipz)$ alors :

$$\langle \psi_H | \vec{r}_H | \psi_H \rangle = z_0 + \frac{p_z t}{\sqrt{m^2 + pz^2}} + 0$$

On voit donc que le terme oscillant a pour origine une interférence entre les solutions d'énergie positive et négative.

Remarque : avec un logiciel de calcul scientifique comme mathematica, on obtient facilement :

$$H = \begin{pmatrix} m & 0 & pz & px - ipy \\ 0 & m & px + ipy & -pz \\ pz & px - ipy & -m & 0 \\ px + ipy & -pz & 0 & -m \end{pmatrix}.$$

$$H^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{m}{m^2 + px^2 + py^2 + pz^2} & 0 & \frac{pz}{m^2 + px^2 + py^2 + pz^2} & \frac{px - ipy}{m^2 + px^2 + py^2 + pz^2} \\ 0 & \frac{m}{m^2 + px^2 + py^2 + pz^2} & \frac{px + ipy}{m^2 + px^2 + py^2 + pz^2} & -\frac{pz}{m^2 + px^2 + py^2 + pz^2} \\ \frac{pz}{m^2 + px^2 + py^2 + pz^2} & \frac{px - ipy}{m^2 + px^2 + py^2 + pz^2} & -\frac{m}{m^2 + px^2 + py^2 + pz^2} & 0 \\ \frac{px + ipy}{m^2 + px^2 + py^2 + pz^2} & -\frac{pz}{m^2 + px^2 + py^2 + pz^2} & 0 & -\frac{m}{m^2 + px^2 + py^2 + pz^2} \end{pmatrix}$$

Pour $px = py = 0$:

$$\exp(2iHt) = \begin{pmatrix} \cos[2\sqrt{m^2 + pz^2}t] - \frac{im \sin[2\sqrt{m^2 + pz^2}t]}{\sqrt{m^2 + pz^2}} & 0 & -\frac{ipz \sin[2\sqrt{m^2 + pz^2}t]}{\sqrt{m^2 + pz^2}} & 0 \\ 0 & \cos[2\sqrt{m^2 + pz^2}t] - \frac{im \sin[2\sqrt{m^2 + pz^2}t]}{\sqrt{m^2 + pz^2}} & 0 & \frac{ipz \sin[2\sqrt{m^2 + pz^2}t]}{\sqrt{m^2 + pz^2}} \\ -\frac{ipz \sin[2\sqrt{m^2 + pz^2}t]}{\sqrt{m^2 + pz^2}} & 0 & \cos[2\sqrt{m^2 + pz^2}t] + \frac{im \sin[2\sqrt{m^2 + pz^2}t]}{\sqrt{m^2 + pz^2}} & 0 \\ 0 & \frac{ipz \sin[2\sqrt{m^2 + pz^2}t]}{\sqrt{m^2 + pz^2}} & 0 & \cos[2\sqrt{m^2 + pz^2}t] + \frac{im \sin[2\sqrt{m^2 + pz^2}t]}{\sqrt{m^2 + pz^2}} \end{pmatrix}$$

M - Épilogue. Sortie du problème ?

- *théorie quantique des champs*
- *réhabilitation de l'équation de K-G.*

Tous ces paradoxes et ces difficultés d'interprétation sont levés en théorie quantique des champs, où le lagrangien de la théorie est construit dès le départ à partir d'opérateurs de création et d'annihilation de particules. Les équations s'appliquent donc à des opérateurs, c'est une généralisation de la représentation de Heisenberg, où le temps et les coordonnées d'espace jouent des rôles similaires. Grâce aux propriétés de commutation et d'anticommutation de ces opérateurs, on peut s'arranger pour éviter l'émergence de masses négatives, à condition d'imposer le principe de Pauli aux fermions et de symétrisation aux bosons. Ainsi se trouve « démontrée » la relation entre spin et statistique. La théorie des champs a ses propres difficultés, on ne peut pas la considérer comme une théorie complètement aboutie, mais ses succès sont remarquables : elle est à la base du modèle standard de la physique des particules, qui décrit correctement les phénomènes microscopiques sur plus de 24 ordres de grandeur en énergie, du peV au TeV.

Il est intéressant aussi de noter qu'on a pu réhabiliter l'équation de K-G, et l'écrire sous forme d'équation du premier ordre en temps appliquée une fonction d'onde à deux composantes (et non 4), ce qui explique pourquoi il faut deux conditions initiales pour la résoudre complètement. Le courant conservé s'interprète alors comme un courant de densité de charge, et il peut donc être positif ou négatif. L'équation de K-G décrit ainsi une paire particule-antiparticule chargée sans spin, comme les mésons π^\pm , et permet de calculer assez bien les niveaux d'énergie des atomes pioniques, atomes dans lesquels on remplace un électron par un pion. L'interaction forte des pions avec le noyau apporte cependant des petites perturbations difficiles à calculer et limite la précision des prédictions.