Introduction à l'opérateur de Dirac.

B. Parisse
Institut Fourier
UMR 5582
BP74X
38402 St Martin d'Hères Cédex

11 Mars 1997

On s'intéresse ici à des particules soumises à des champs de forces externes modélisables par des potentiels (par exemple un champ électromagnétique). L'équation de Dirac est l'analogue relativiste de l'équation de Schrödinger, elle-même issue de la mécanique classique newtonienne.

1 Mécanique classique.

En mécanique classique, les particules sont considérées comme des points, on cherche à décrire l'évolution de leur trajectoire. La mécanique classique (newtonienne ou relativité restreinte) suppose l'existence d'une catégorie priviligiée de repères (galiléens). Ces repères sont en translation rectiligne uniforme les uns par rapport aux autres et les équations de la mécanique prennent la même forme dans tous ces repères (il n'y a pas de repère galiléen priviligié). En mécanique classique newtonienne, le temps est absolu alors qu'en relativité restreinte la vitesse de la lumière c est une constante absolue. Ce n'est qu'en relativité générale que le concept de repère galiléen est abandonné (tous les repères sont alors équivalents).

1.1 Mécanique newtonienne.

L'équation fondementale de la dynamique s'écrit dans un repère galiléen:

$$\frac{dp}{dt} = F, \quad p = mv$$

v vitesse de la particule, p la quantité de mouvement, F la force (par exemple $F = -e\nabla V$ dans un champ électrique pour une particule de charge e). On peut réécrire cette équation sous forme variationnelle, ce qui permet de l'appliquer dans un système de coordonnées non cartésien. On pose dans un repère galiléen:

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - eV(x)$$

Alors une trajectoire physique est un point critique de l'action:

$$S(\gamma) = \int_\gamma L \ dt$$

parmi les trajectoires ayant les mêmes extrémités. Ce qui se traduit par les équations d'Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\right) = \frac{\partial L}{\partial x_i}$$

La covariance des équations de la mécanique newtonienne par changement de référentiel galiléen est la conséquence de:

- l'invariance de la partie cinétique de L par isométrie

- pour les translations rectilignes uniformes, la partie cinétique de L devient:

$$\tilde{L} = L + mC\dot{x} + \frac{1}{2}mC^2$$

ce qui change l'action d'une constante indépendante du chemin (puisque le temps est absolu et que les extrémités sont fixées).

Dans ce formalisme, on retrouve la quantité de mouvement et l'énergie par:

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}, \quad H = \dot{x}.p - L$$

l'énergie H est conservée lorsque L ne dépend pas explicitement du temps:

$$\frac{dH}{dt} = \dot{\dot{x}}.p + \dot{x}.\dot{p} - \frac{\partial L}{\partial x}.\dot{x} - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}.\dot{\dot{x}} = 0$$

La relation fondementale énergie-impulsion est ici:

$$H = \frac{p^2}{2m} \tag{1}$$

1.2 Relativité restreinte.

Depuis l'expérience de Michelson et Morlay (qui montre que la vitesse de la lumière est constante (c) dans tous les repères galiléens), on sait que la mécanique newtonienne n'est plus valide à grande vitesse. En effet, si le temps était absolu, les vitesses s'additionneraient et la vitesse de la lumière varierait d'un repère galiléen à un autre. Le temps est donc inhérent au repère choisi et on a de plus une correspondance entre le temps et les longueurs via la constante c (il n'y a plus d'étalon de longueur en vigueur, le mètre est défini à partir de la seconde et de $c = 299792458 m/s$, la seconde est elle-même définie à partir de la fréquence de la raie de transition entre 2 états quantiques de l'atome de Césium). Ceci impose donc de prendre des repères de dimension 3+1.

Il s'agit maintenant de comprendre comment on passe d'un repère galiléen à un autre afin de déterminer une formule pour l'action telle que:

- à petite vitesse on retrouve l'action newtonienne
- les équations de la mécanique soient covariantes par changement de repère galiléen.

1.2.1 Changement de repères.

Pour les isométries de $\mathbb{R}^3$, on prolonge bien sur par $t \to t$. Il suffit donc de comprendre la transformation associée à une translation uniforme de vitesse v. On commence par normaliser le temps en le multipliant par c pour des raisons d'homogénéité. Notre transformation doit être linéaire, on la représente donc par une matrice M 4×4. Sans restreindre la généralité, on peut supposer que v est dans la première direction. On peut décomposer l'espace-temps en deux sous-espaces de dimension 2: le premier contient le temps et la direction de déplacement, le deuxième les 2 directions spatiales orthogonales. Ces deux sous-espaces sont conservés par M. Dans le premier sous-espace $((x,t))$, les vecteurs $(1,1)$ et $(-1,1)$ sont vecteurs propre (puisque la vitesse de la lumière est constante) de valeurs propres respectives α et β (qui dépendent de la vitesse v). Enfin, changer v en $-v$ revient à changer le sens du temps ($(1,1)$ devient $-(-1,1)$), donc $\alpha(-v) = \beta(v)$.

La matrice de la transformation restreinte à (x,t) s'écrit:

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}$$

Revenons à la base canonique, on a:

$$\tilde{M} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^{-1}$$

D'où:

$$\tilde{M} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \alpha+\beta & \alpha-\beta \\ \alpha-\beta & \alpha+\beta \end{pmatrix}$$

On remarque que l'origine du repère en translation se déplace à la vitesse v dans le repère de départ et 0 dans son propre repère donc:

$$\tilde{M}\begin{pmatrix} \frac{v}{c} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ ? \end{pmatrix}$$

d'où:

$$(\alpha+\beta)\frac{v}{c} + (\alpha-\beta) = 0 \tag{2}$$

Comme:

$$\tilde{M}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha-\beta \\ \alpha+\beta \end{pmatrix}$$

on en déduit que la vitesse du premier repère dans le repère en translation est $-v$. Ce qui signifie que l'inverse de M est la matrice correspondant à la vitesse de translation $-v$. Donc

$$\alpha(v) = \frac{1}{\alpha(-v)} = \frac{1}{\beta(v)}$$

.

On peut maintenant déterminer α à l'aide de (2)

$$\alpha = \pm\sqrt{\frac{1-\frac{v}{c}}{1+\frac{v}{c}}}, \quad v < c$$

et:

$$\frac{\alpha^2+1}{2\alpha} = \pm\frac{1}{\sqrt{1-\frac{v}{c}^2}}$$

Il faut choisir le signe + sous peine de changer l'orientation en temps.

Pour les directions y et z, que la vitesse soit v ou $-v$ ne change rien donc la valeur propre correspondante est égale à son inverse, comme elle vaut 1 pour $v = 0$, les valeurs propres selon y et z valent 1 par continuité. On obtient ainsi:

$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v}{c}^2}} & 0 & 0 & \frac{-\frac{v}{c}}{\sqrt{1-\frac{v}{c}^2}} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{-\frac{v}{c}}{\sqrt{1-\frac{v}{c}^2}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v}{c}^2}} \end{pmatrix}$$

Enfin, on vérifie que la vitesse de la lumière est conservée dans toutes les directions. On montre en fait que la forme quadratique $q(dx_1, dx_2, dx_3, cdt) = c^2dt^2 - dx_1^2 - dx_2^2 - dx_3^2$ est conservée par M:

$${}^tM\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}M = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Comme les trajectoires de vitesse c ont un vecteur directeur dans le noyau de q elles conservent leur vitesse après tranformation.

1.2.2 L'action relativiste.

Comme q est invariant par changement de repère galiléen, on peut construire une action invariante en posant:

$$S = C \int_\gamma \sqrt{q(dx_1, dx_2, dx_3, cdt)}$$

Il reste à déterminer si une telle action est compatible avec l'action newtonienne dans la limite des faibles vitesses. On a:

$$\sqrt{q(dx, cdt)} = \sqrt{1 - \left(\frac{dx}{cdt}\right)^2}\, cdt = c\left(1 - \frac{\dot{x}^2}{2c^2} + O\left(\left(\frac{\dot{x}}{c}\right)^4\right)\right)$$

On retrouve à une constante près l'action newtonienne à condition de poser $C = -mc$, finalement l'action d'une particule libre est:

$$S = \int_\gamma -mc^2 \sqrt{1 - \left(\frac{\dot{x}}{c}\right)^2}\, dt$$

On en déduit:

$$p = \frac{m\dot{x}}{\sqrt{1 - \left(\frac{\dot{x}}{c}\right)^2}}, \quad H = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{\dot{x}}{c}\right)^2}}$$

et la relation fondementale énergie-impulsion devient:

$$H^2 = p^2c^2 + m^2c^4 \tag{3}$$

2 Quantification

On peut reformuler les équations de la mécanique classique en utilisant les variables (x, p) au lieu des variables $(x, \dot{x})$. On obtient alors les équations de Hamilton:

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

Une observable est une fonction $(x, p) \to f(x, p)$ (par exemple l'altitude x_3, ...). Pour connaître la valeur de l'observable à l'instant t, on remplace simplement x et p par les coordonnées de la particule à cet instant. Son évolution dans le temps est alors donnée par l'équation différentielle:

$$\dot{f} = \{H, f\}$$

où $\{.,.\}$ désigne le crochet de Poisson.

En mécanique quantique, les particules ne sont plus des points mais ont des propriétés ondulatoires (elles acquièrent une certaine "épaisseur", des phénomènes d'interférence appraissent), on les represente par une fonction (d'onde) normée d'un espace de Hilbert, par exemple $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ (dans ce cas, le module au carré de la valeur de la fonction en un point représente la densité de probabilité d'observer la particule en ce point). Les observables sont des opérateurs autoadjoints (non-bornés) de L^2, la valeur de l'observable $\hat{f}$ sur une particule dans l'état φ est donnée par le produit scalaire:

$$f(t) = (\varphi(t), \hat{f}\varphi(t))$$

L'évolution de la fonction d'onde au cours du temps est gouvernée par une observable $\hat{H}$ associee au hamiltonien:

$$ih\frac{d\varphi}{dt} = \hat{H}\varphi$$

On en déduit l'évolution d'une observable:

$$\dot{f}(t) = (\varphi(t), \frac{i}{h}[\hat{H}, \hat{f}]\varphi(t))$$

où $[.,.]$ désigne le commutateur.

Lorsque le système est "classique" (c'est le cas des systèmes macroscopiques en général), la fonction d'onde est en gros une gaussienne centrée en un point, on souhaite que ce point subisse les équations de la mécanique classique! On doit donc avoir une correspondance $f \to \hat{f}$ telle que

$$\dot{f}(t) = (\varphi(t), \widehat{\{H, f\}}\varphi(t))$$

ou encore:

$$\frac{i}{h}[\hat{H}, \hat{f}] = \widehat{\{H, f\}}$$

On a donc:

$$\widehat{\{p, x\}} = \frac{i}{h}[\hat{p}, \hat{x}] = \hat{1} = 1$$

d'où:

$$\hat{x}\varphi(t,x) = x\varphi(t,x) \quad \hat{p}\varphi(t,x) = \frac{h}{i}\frac{\partial\varphi}{\partial x}$$

Pour la mécanique classique newtonienne, on obtient par ce procédé:

$$ih\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{h^2}{2m}\Delta\varphi$$

c'est l'équation de Schrödinger libre. Si on fait de même avec la relation (3), on obtient une équation du second ordre. On peut envisager 2 méthodes pour se ramener à une équation du premier ordre:

- prendre $L^2 \times L^2$ comme espace de fonctions d'onde et utiliser la méthode habituelle de tranformation d'une équation du 2ème ordre en équation du premier ordre
- exprimer H en fonction de p et m et quantifier la racine carrée à l'aide d'opérateurs pseudodifférentiels.

Aucune de ces deux méthodes ne respecte le principe de covariance entre le temps et l'espace. D'où l'idée de changer d'espace de fonctions d'ondes. Peut-on trouver un espace vectoriel $\mathbb{C}^m$ tel que dans $L^2(\mathbb{R}^3;\mathbb{C}^m)$ la relation (3) soit compatible avec une relation linéaire à coefficient matriciels $m \times m$ entre H et p? La réponse à été donnée dans l'exposé de J.Bertin, c'est possible et la dimension m=4 est la plus petite dimension possible. On peut refaire le raisonnement dans ce cas particulier: on part de

$$H^2 - p^2c^2 = m^2c^4$$

qui doit être compatible avec

$$\sum_{j=0}^{4} \gamma_i p_i = mc1_4$$

où les γ_i sont des matrices, et $p_0 = H/c$. C'est le cas si et seulement si:

$$\gamma_i\gamma_j + \gamma_j\gamma_i = 2q_{ij}1_4$$

où q_{ij} désigne le coefficient i,j de la forme quadratique q. De plus, comme H doit être une observable, il faut exiger que γ_0 et les $\gamma_0\gamma_i$ soient hermitiennes ou encore que les γ_i soient antihermitiennes.

On en déduit que tous les γ_i sont inversibles et diagonalisables de valeurs propres ± 1 pour γ_0 (et $\pm i$ pour les autres). Soit E_+ et E_- les espaces propres correspondant à γ_0. Comme γ_0 anticommute avec les γ_i ces dernières agissent de $E_\pm$ et $E_\mp$ qui ont donc même dimension. On décompose les matrices sur ces espaces:

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ -\sigma_j^* & 0 \end{pmatrix}$$

On obtient alors:

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}1_2$$

On reprend le raisonnement précédent, on en déduit que dans une décomposition appropriée, on a:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \sigma_j = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_j \\ \varepsilon_j^{-1} & 0 \end{pmatrix}$$

Quitte à changer de normalisation les vecteurs de base, on peut supposer que $\varepsilon_2 = -i$, on a alors $\varepsilon_3 = \pm 1$. On choisit le signe + afin d'avoir une base directe:

$$\sigma_j \sigma_k = i\varepsilon_{jkl}\sigma_k$$

Les σ_j sont appelés matrices de Pauli.

L'équation de Dirac (libre) s'écrit donc:

$$i\frac{h}{c}\gamma_0\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \sum_{j=1}^{3}\frac{h}{i}\gamma_j\frac{\partial\varphi}{\partial x_i} = mc\varphi$$

Mise sous une forme ressemblant plus à l'équation de Schrödinger, cela donne en posant $\alpha_j = -\gamma_0\gamma_j = \gamma_j\gamma_0$:

$$ih\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{hc}{i}\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial\varphi}{\partial x_i} + mc^2\gamma_0\varphi$$

L'opérateur de Dirac est ainsi:

$$D(h) = \frac{hc}{i}\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i} + mc^2\gamma_0$$

En présence d'un champ électromagnétique (V, A):

$$ih\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \sum_{j=1}^{3}\alpha_j\left(\frac{hc}{i}\frac{\partial\varphi}{\partial x_i} - A_j(x)\varphi\right) + mc^2\gamma_0\varphi + V(x)\varphi$$

3 Spin

L'opérateur de Schrödinger libre est invariant par rotation, il commute avec les générateurs des rotations:

$$L_j = \sum_{k,l}\varepsilon_{jkl}x_k D_l$$

Ce qui traduit le fait que l'hamiltonien $H = p^2/2m$ est invariant par rotation. Ce n'est pas le cas du hamiltonien de Dirac

$$H = mc^2\gamma_0 + \sum_{j=1}^{3}\alpha_j p_j c$$

car les α_j ne bougent pas lors d'une rotation. Pour rendre H invariant, il faut rajouter à la rotation du repère une rotation "interne" qui agisse sur les matrices α_j pour pouvoir considérer $\sum_{j=1}^{3}\alpha_j p_j$ comme un gradient (où on remplace $\mathbb{R}^3$ par un espace de dimension 3 engendré par les matrices α_j).

Considérons par exemple une rotation autour de x_3 (correspondant à $\exp(i\theta L_3)$). Il faut trouver le générateur de la rotation correspondant dans l'espace des α_j. Or:

$$e^{i\theta\frac{\alpha_1\alpha_2}{2i}}\alpha_j = R_{\theta,x_3}(\alpha_j)e^{i\theta\frac{\alpha_1\alpha_2}{2i}}$$

Donc on pose:

$$S_3 = \frac{\alpha_1\alpha_2}{2i}$$

et de même par permutation circulaire S_1 et S_2. Le moment cinétique total:

$$J = S + L$$

commute avec H et est donc globalement conservé, sa composante interne S est appelé le spin. On remarque aussi que $S_j^2 = 1/4$ donc le spin selon une direction possède deux valeurs propres $\pm 1/2$. L_j commute avec S_k, on peut donc conclure que J_j admet comme valeurs propres des entiers+1/2.

4 Spectre de l'opérateur de Dirac libre.

On montre que l'opérateur de Dirac est essentiellement autoadjoint, son spectre est du spectre absolument continu:

$$\sigma =]-\infty, -mc^2] \cup [mc^2, +\infty[.$$

La partie $[mc^2, +\infty[$ correspond à l'opérateur de Schrödinger décalée de l'énergie de masse mc^2. L'interprétation de l'autre partie est plus délicate, habituellement on considère que les états d'énergie négative sont occupés, de temps en temps un "trou" d'énergie négative peut apparaître, il s'agit alors d'une antiparticule.

5 Un exemple de corrections relativiste.

Dans le cas d'un atome hydrognéoide, on peut calculer explicitement le spectre en utilisant la symétrie radiale du potentiel coulombien engendré par un noyau de charge Z:

$$V(x) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 |x|}$$

(l'opérateur de Dirac commute avec l'opérateur J de moment cinétique total). Les calculs donnent alors un spectre discret juste en-dessous de l'énergie de masse Mc^2:

$$E_{n,j,m,\mu} = Mc^2 \left(1 + \left(\frac{\alpha Z}{n + \sqrt{\mu^2 - (\alpha Z)^2}} \right)^2 \right)^{-1/2}$$

où:

- α est la constante de structure fine peu différente de $1/137$:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c}$$

- j et m sont associés au moment cinétique total, pour le vecteur propre associé à E on a:

$$J^2\varphi = j(j+1)\varphi, \quad J_3\varphi = m\varphi$$

  On a $j + 1/2$ entier strictement positif et $m \in \{-j, -j+1, ..., j-1, j\}$.

- $\mu = \pm(j + 1/2)$ est aussi associé au moment cinétique total, plus précisément $\mu + 1/2$ est la valeur propre associée à $\sum_{k=1}^{3} \sigma_k J_k$.

- n est un entier positif, si $n = 0$ μ est toujours négatif, si $n \neq 0$, μ peut prendre les deux signes ci-dessus.

En limite non relativiste ($\alpha Z << 1$), on retrouve les valeurs propres d'un noyau hydrogénoide pour l'opérateur de Schrödinger:

$$E = Mc^2 \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha^2 Z^2}{(n + |\mu|)^2} \right)$$

($n + |\mu|$ est le nombre quantique principal en mécanique quantique non relativiste).

La dégénérescence des niveaux est beaucoup plus grande en limite non relativiste qu'en relativiste. c'est pour cela qu'α est appelée constante de structure fine. Pour donner une idée des ordres de grandeur des corrections relativistes, le niveau fondemental de l'hydrogéne vaut $-13.6052eV$ en relativiste et $-13.6057eV$ en non relativiste. Néanmoins pour des noyaux plus gros, αZ est moins petit et les corrections sont plus importantes. Enfin, seule la théorie relativiste permet d'introduire le spin de manière naturelle, en non relativiste on est obligé de rajouter un opérateur de spin ayant deux valeurs propres et qui commute avec tout le monde pour multiplier par 2 la multiplicité de tous les niveaux.

6 Un mot de relativité générale.

Il s'agit toujours de particules placées dans un champ extérieur (on néglige l'interaction de la particule avec le champ qu'elle crée). On a vu que c'est la métrique lorentzienne constante qui gouverne les équations de la mécanique (les trajectoires en l'absence de champ sont les géodésiques). Cela se généralise pour toute métrique lorentzienne. Localement, on peut toujours se ramener à la métrique $c^2dt^2 - dx^2$, dans un tel repère l'équation de Dirac est (localement) valide. Globalement, pour qu'on puisse quantifier, il faut une condition sur la variété espace-temps.