18.11.80

Etude des corrections relativistes par la méthode de l'hamiltonien effectif (1ère partie)

But de ce cours

Obtenir, à partir de l'équation de Dirac (en seconde quantification pour tenir compte des effets à plusieurs particules), l'expression d'un hamiltonien effectif à une particule, agissant sur les spineurs à 2 composantes, incluant les premières corrections relativistes jusqu'à l'ordre 2 inclus en $1/m$ et $1/c$, ainsi que le couplage avec un champ de rayonnement quantifié, et tenant compte des créations virtuelles de paires e^+-e^-. Problème très important pour justifier l'existence des hamiltoniens utilisés en physique des basses énergies

Plan de ce cours

A - L'équation de Dirac
1. Introduction simple de cette équation T1 à T7
2. La difficulté des états d'énergie négative. La théorie des trous. (T8 à T10)
3. Seconde quantification de l'équation de Dirac. Théorie à N particules T11 à T13

B - Limite faiblement relativiste. Comment introduire un hamiltonien effectif?
1. Idée générale T14 à T15
2. Théorie à 1 particule T16 à T18
3. Théorie à N particules. T19 à T22

Equation de Schrödinger

T-1

Relation E, $\vec{p}$ pour une particule libre

$$E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}$$

Règles de correspondance

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \qquad \vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

$$\hookrightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi$$

Courant et densité de probabilité

$$\begin{cases} \rho = \psi^*\psi \geq 0 \\ \vec{j} = \dfrac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*(\vec{\nabla}\psi) - (\vec{\nabla}\psi^*)\psi\right] \end{cases}$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}.\vec{j} = 0$$

Conservation de la probabilité

Particule en présence d'un champ électromagnétique

Potentiels $(\vec{A}, \phi)$

$$E \to E - e\phi \qquad \vec{p} \to \vec{p} - e\vec{A}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A}\right)^2\psi + e\phi\psi$$

Relation E, $\vec{p}$ pour une particule relativiste

T-2

$$\frac{E}{c} = \sqrt{\vec{p}^{\,2} + m^2c^2} \qquad (1)$$

- Difficultés pour définir l'opérateur

$$\sqrt{m^2c^2 - \hbar^2\Delta}$$

- Dissymétries entre les rôles joués par $\frac{\partial}{\partial t}$ et $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$

Si l'on part, non pas de (1), mais de

$$\frac{E^2}{c^2} = \vec{p}^{\,2} + m^2c^2 \qquad (2)$$

on obtient une équation du 2ème ordre en $\frac{\partial}{\partial t}$ et non du 1er. (Equation de Klein-Gordon)

T-3

Equation de Dirac

Idée générale

- Partir d'une relation linéaire à la fois en E et en $\vec{p}$.

(i) On veut avoir $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ et non $\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$

(ii) x, y, z, t jouent des rôles symétriques en relativité.

- Cette relation doit être compatible avec

$$\frac{E^2}{c^2} = \vec{p}^{\,2} + m^2c^2 \qquad (1)$$

En l'élevant au carré, on doit obtenir (1)

Réalisation

- Relation linéaire $\{E, \vec{p}\}$ la plus générale

$$E = c\,\vec{\alpha}.\vec{p} + \beta m c^2 \qquad (2)$$

$\vec{\alpha}, \beta$: quantités réelle sans dimensions

- Elevons (2) au carré

$$E^2 = c^2 \sum_i \sum_j \alpha_i \alpha_j \, p_i p_j + m c^3 \sum_i (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) p_i + \beta^2 m^2 c^4 \qquad (3)$$

T-4

Conditions pour que (3) redonne (1)

p_i et p_j commutent toujours. On peut donc réécrire la 1ère ligne de (3)

$$c^2 \sum_i \sum_j \frac{\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i}{2} \, p_i p_j$$

En identifiant (3) et (1), on obtient

$$\begin{cases} \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij} \\ \beta \alpha_i + \alpha_i \beta = 0 \\ \beta^2 = 1 \end{cases} \qquad (4)$$

Impossibilité de satisfaire à (4) en prenant des nombres pour $\vec{\alpha}$ et β

$\vec{\alpha}$ et β sont nécessairement des matrices (hermitique)

ψ est donc nécessairement une fonction d'ondes à plusieurs composante (spineur). La particule a à la fois

- des degrés de liberté externes ($\vec{r}, \vec{p}, \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \dots$)
- des degrés de liberté internes sur lesquels agissent $\vec{\alpha}$ et β.

T-5

Les matrices de Dirac

On trouve que α_i et β doivent être au minimum des matrices 4×4 pour que les conditions (4) soient réalisées

Réalisation de dimension 4

Rappelons tout d'abord l'expression des matrices 2×2 de Pauli

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

On vérifie alors aisément que les relations (4) sont satisfaites si l'on prend

$$(\alpha_i) = \left(\begin{array}{c|c} 0 & \sigma_i \\ \hline \sigma_i & 0 \end{array}\right) \qquad (\beta) = \left(\begin{array}{c|c} \mathbb{1} & 0 \\ \hline 0 & -\mathbb{1} \end{array}\right)$$

En effet,

$$(\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) = \left(\begin{array}{c|c} \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i & 0 \\ \hline 0 & \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i \end{array}\right) = 2\delta_{ij}$$

car $\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij}$

On vérifie de même aisément que

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \qquad \beta^2 = 1$$

T-6

Courant et densité de probabilité

$$\rho = \psi^+ \psi \qquad \vec{j} = c\, \psi^+ \vec{\alpha}\, \psi$$

On a bien

$$\begin{cases} \rho \geq 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla}.\vec{j} = 0 \end{cases}$$

Hamiltonien de Dirac $\mathcal{H}_D$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \mathcal{H}_D \psi$$

Particule libre

$$\mathcal{H}_D = \beta m c^2 + c\,\vec{\alpha}.\vec{p}$$

avec $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$

Particule dans un champ électromagnétique

Potentiels $\vec{A}$, ϕ

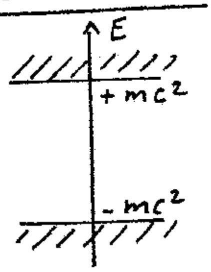
$$\mathcal{H}_D = \beta m c^2 + c\,\vec{\alpha}.\vec{\pi} + e\,\phi$$

avec $\vec{\pi} = \vec{p} - e\vec{A} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - e\vec{A}$

$\vec{\rho}$ et $\vec{j}$ gardent la même forme en présence de $\vec{A}$, ϕ

Spectre de $\mathcal{H}_D$ pour une particule libre T-7

$\vec{p}$ et $\mathcal{H}_D$ commutent
On trouve aisément
le spectre suivant
2 continuums
$E = \pm\sqrt{m^2c^4 + \vec{p}^{\,2}c^2}$



Forme des états propres pour une particule au repos : $\vec{p} = 0$

On a alors $\mathcal{H}_D = \beta mc^2$
4 états propres très simples

$$\underbrace{\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix} \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}}_{E=+mc^2} \qquad \underbrace{\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix} \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}}_{E=-mc^2}$$

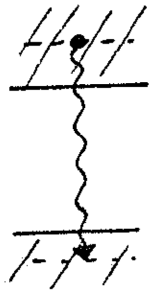
Une particule au repos, d'énergie $+mc^2$, peut exister dans 2 états internes différents (spin 1/2)
Résultat qui demeure valable pour $\vec{p} \neq 0$ (par transformation de Lorentz)
Pour $\vec{p} \neq 0$, les 4 composantes sont en général $\neq 0$.

T-8 Difficulté des états d'énergie < 0

Spectre d'énergies négatives s'étendant jusqu'à $-\infty$!

<u>1ère attitude possible</u>

- On considère les états d'énergie < 0 comme des solutions mathématiques parasites
  Les seuls états physiques acceptables sont les états d'énergie > 0
- Objection grave :
  Le couplage avec un champ de rayonnement quantique, a des éléments non-diagonaux entre états d'énergie > 0 et < 0.
  Un électron dans un état d'énergie > 0 peut émettre spontanément un photon et "tomber" dans un état d'énergie < 0

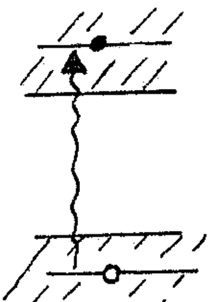


Instabilité des états d'énergie > 0 vis à vis de l'émission spontanée !

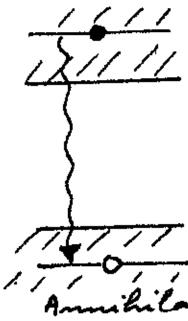
<u>2ème attitude</u> : Idée de Dirac T-9

- Tous les états d'énergie < 0 sont remplis. Comme les électrons sont des fermions (spins 1/2), le principe de Pauli interdit à un électron d'énergie > 0 de tomber dans un état d'énergie < 0 déjà occupé.
  Suppression de la difficulté précédente.
- Prédiction nouvelle suggérée par l'idée précédente.
  <u>L'absence</u> d'un électron d'énergie $E < 0$, de charge e, d'impulsion $\vec{p}$ de spin μ est équivalente à la <u>présence</u> d'une particule d'énergie $-E > 0$, de charge $-e$, d'impulsion $-\vec{p}$, de spin $-\mu$.
  Prédiction du <u>positron</u>, antiparticule de l'électron
  Un positron apparait comme un "<u>trou</u>" dans le continuum des états d'énergie < 0.

Autres prédictions intéressantes. T-10



Création de paires e^+-e^- par absorption d'un photon



Annihilation d'une paire e^+-e^- par émission d'un photon

<u>Conclusion</u>

L'équation de Dirac ne peut être conservée dans le cadre des théories à 1 particule.
Elle ne peut être interprétée de manière satisfaisante que dans le cadre des théories à un nombre indéterminé de particules. (Théorie quantique des champs)

Seconde quantification de l'équation de Dirac

T 11

u_k : Fonction propre commune à $\vec{p}$ et $\mathcal{H}_D$ de valeurs propres $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, $E_p = +\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$

$v_{\bar{k}}$: " " " " $-\vec{p} = -\hbar\vec{k}$, $-E_p = -\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$

Développement de la fonction d'onde la plus générale ψ sur la base des états propres de $\mathcal{H}_D$

$$\psi = \sum_k \alpha_k u_k(\vec{r}) + \sum_{\bar{k}} \alpha_{\bar{k}} v_{\bar{k}}(\vec{r})$$

ψ est la fonction d'onde la plus générale de la théorie à une particule.

On quantifie ψ en remplaçant les coefficients du développement α_k $\alpha_{\bar{k}}$ par des opérateurs d'annihilation d'un electron dans l'état correspondant

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_k c_k u_k(\vec{r}) + \sum_{\bar{k}} c_{\bar{k}} v_{\bar{k}}(\vec{r})$$

Champ quantique de Dirac
Relations d'anticommutation pour les c et c^+ (fermions)

Reinterprétation de $c_{\bar{k}}$ et $c^+_{\bar{k}}$

T12

On pose $c_{\bar{k}} = b^+_k$ $\quad c^+_{\bar{k}} = b_k$

Détruire un electron $-\vec{p}, -E_p$ revient à créer un positron $+\vec{p}, +E_p$.

Créer un electron $-\vec{p}, -E_p$ revient à détruire un positron $+\vec{p}, +E_p$

b et b^+ sont donc des opérateurs d'annihilation et de création d'un positron

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_k \left(c_k u_k(\vec{r}) + b^+_k v_{\bar{k}}(\vec{r}) \right)$$

Relations d'anticommutation

De $[c_i, c_j]_+ = [c_i^+, c_j^+] = 0$

$[c_i, c_j^+]_+ = \delta_{ij}$

on déduit

$$[c_k, c_{k'}]_+ = [c_k^+, c_{k'}^+]_+ = [b_k, b_{k'}]_+ = [b_k^+, b_{k'}^+]_+ =$$

$$[c_k, b^+_{k'}]_+ = [c^+_k, b_{k'}]_+ = 0$$

$$[c_k, c^+_{k'}]_+ = \delta_{kk'} \qquad [b_k, b^+_{k'}]_+ = \delta_{kk'}$$

Hamiltonien de Dirac en seconde quantification

T-13

A l'hamiltonien $\mathcal{H}_D$ de la théorie à une particule, on associe l'hamiltonien suivant en seconde quantification

$$H_D = \int d^3r\, \Psi^+(\vec{r})\, \mathcal{H}_D\, \Psi(\vec{r}) =$$

$$\sum_k \underbrace{\langle u_k|\mathcal{H}_D|u_k\rangle}_{E_k} c_k^+ c_k + \sum_{\bar{k}} \underbrace{\langle v_{\bar{k}}|\mathcal{H}_D|v_{\bar{k}}\rangle}_{-E_k} c^+_{\bar{k}} c_{\bar{k}}$$

$$= \sum_k \left(E_k c_k^+ c_k - E_k b_k b_k^+ \right)$$

Or $b_k b_k^+ = 1 - b_k^+ b_k$

Donc

$$H_D = E_0 + \sum_k E_k N_k^e + \sum_k E_k N_k^p$$

avec

$N_k^e = c_k^+ c_k$ nbre d'electrons d'énergie E_k

$N_k^p = b_k^+ b_k$ " de positrons " "

$E_0 = \sum_k (-E_k)$: énergie du vide (inobservable)

Seules sont observables les déviations par rapport au vide

Limite faiblement relativiste

T-14

La seule théorie valable est bien sur la théorie à N particules. Il existe cependant des situations

- vitesses faibles devant c
- Interactions avec des champs variant suffisamment lentement dans le temps et dans l'espace

pour lesquelles les états correspondant à un électron forment une multiplicité bien isolée des autres. Les créations de paires $e^+ - e^-$ sont alors virtuelles et non réelles.

Peut-on tenir compte de ces créations virtuelles de paires pour introduire un hamiltonien effectif agissant dans le sous espace des états à 1 particule ?

T-15

Idée générale suivie

1 - Prendre pour hamiltonien non-perturbé

$$H_0 = \int d^3r\, \Psi^+(\vec r)\, \beta mc^2\, \Psi(\vec r)$$ Théorie à N particules

On verra que le spectre de H_0 est formé de multiplicités bien séparées correspondant chacune à des nombres bien définis d'électrons et de positrons.

2 - Considérer le reste de l'hamiltonien V comme une perturbation couplant entre elles les multiplicités propres de H_0

3 - Traiter l'effet de cette perturbation dans la multiplicité à un électron par la méthode de l'hamiltonien effectif.

Auparavant, on appliquera une méthode analogue à l'hamiltonien de Dirac à 1 particule. On prendra

$$\mathcal{H}_0 = \beta mc^2$$

$\mathcal{H}_0$ a 2 multiplicités propres $\mathcal{E}_\pm$ d'énergie $\pm mc^2$. On étudiera l'effet des transitions virtuelles induites par V entre $\mathcal{E}_+$ et $\mathcal{E}_-$ par la méthode de l'hamiltonien effectif.

T-16

Théorie à 1 particule

Multiplicités propres de $\mathcal{H}_0 = \beta mc^2$

2 multiplicités $\mathcal{E}_+$ et $\mathcal{E}_-$ infiniment dégénérées séparées de $2mc^2$

$+mc^2$ —— $\mathcal{E}_+$

$-mc^2$ —— $\mathcal{E}_-$

$\mathcal{E}_+$ est sous tendue par des spineurs ayant seulement 2 composantes non nulles (la 1ère et la 2ème) car

$$\mathcal{H}_0 = \beta mc^2 = mc^2 \begin{pmatrix} +1 & & & 0 \\ & +1 & & \\ & & -1 & \\ 0 & & & -1 \end{pmatrix}$$

L'hamiltonien effectif décrivant l'effet de $V = \mathcal{H}_D - \mathcal{H}_0$ dans $\mathcal{E}_+$ agira donc sur des spineurs à 2 composantes

Raccord avec la mécanique quantique non relativiste habituelle

Attention. Cet hamiltonien effectif donne de bonnes approximations pour les énergies (valeurs propres) mais non pour les états propres (contamination de $\mathcal{E}_+$ par $\mathcal{E}_-$)

T-17

Opérateurs "diagonaux" et "non diagonaux"

- Un opérateur "diagonal" n'a d'éléments de matrice non nuls qu'à l'intérieur de $\mathcal{E}_+$ ou $\mathcal{E}_-$

  Exemple : β

- Un opérateur "non diagonal" n'a d'éléments de matrice non nuls qu'entre $\mathcal{E}_+$ et $\mathcal{E}_-$

  Exemple : $\vec\alpha$

$$(\alpha_i) = \left(\begin{array}{c|c} 0 & \sigma_i \\ \hline \sigma_i & 0 \end{array}\right)$$

- $\mathcal{H}_D$ contenant à la fois $\vec\alpha$ et β est à la fois diagonal et non diagonal. La méthode de l'hamiltonien effectif consiste à faire subir à $\mathcal{H}_D$ une transformation unitaire qui le rende diagonal

Méthode de Foldy-Wouthuysen

$$e^{iS_2}\, e^{iS_1}\, \mathcal{H}_D\, e^{-iS_1}\, e^{-iS_2}$$

Suite de transformations unitaires emboitées

Méthode utilisée ici

$$e^{iS}\, \mathcal{H}_D\, e^{-iS} \quad \text{avec} \quad S = \lambda S_1 + \lambda^2 S_2 + \cdots$$

Développement de S

T-18

Expression de la "perturbation" V

On tient compte de l'interaction de la particule avec

- un champ statique extérieur $\vec A_0, \Phi_0$
- le champ de rayonnement quantifié $\vec A, \Phi$

En jauge de Coulomb $\Phi = 0$

$$\mathcal{H}_D = \mathcal{H}_0 + c\vec\alpha\cdot\vec\Pi_t + e\Phi_0 + \mathcal{H}_R + V_{\text{Coulomb}}$$

$$\vec\Pi_t = \underbrace{\vec p - e\vec A_0(\vec r)}_{\vec\Pi_0} - e\vec A(\vec r)$$

$$\mathcal{H}_R = \sum_{k\varepsilon} \hbar\omega \left(a^+_{k\varepsilon} a_{k\varepsilon} + \frac{1}{2}\right)$$ Energie des photons

V_{Coulomb} = Energie du champ électrostatique de la particule (sans conséquence dynamique)

Parties paire ($\mathcal{W}$) et impaire ($\mathcal{U}$) de V

$$\mathcal{U} = c\vec\alpha\cdot\vec\Pi_t$$

$$\mathcal{W} = e\Phi_0(\vec r) + \mathcal{H}_R + V_{\text{Coulomb}}$$

T-19

Théorie à N particules

Indispensable

car on tient compte du couplage avec le rayonnement quantifié. Transitions spontanées se produisant de $\mathcal{E}_+$ vers $\mathcal{E}_-$

Principe du calcul

$\boxed{\text{Eq. de Dirac à 1 partic.}} \xrightarrow[\text{quantif.}]{\text{Seconde}} \boxed{\text{Théorie à N partic.}} \xrightarrow[\text{multiplicité à 1 particule}]{\text{Restriction à la}} \boxed{H_{eff}}$

Problème : de quel hamiltonien à 1 particule, $\mathcal{H}_{eff}$, agissant sur les spineurs à 2 composantes, H_{eff} peut-il être considéré comme l'opérateur associé en seconde quantification ?

$$H_{eff} = \int d^3r \, \Psi^\dagger(\vec{r}) \, \mathcal{H}_{eff} \, \Psi(\vec{r})$$

Attention. $\mathcal{H}_{eff}$ n'a aucune raison de coïncider avec $\mathcal{H}'_{eff}$ obtenu par la méthode de l'hamiltonien effectif appliquée à la théorie de Dirac à 1 particule

$\boxed{\text{Eq. de Dirac à 1 particule}} \xrightarrow[\text{multiplicité } \mathcal{E}_+ \text{ de } \beta mc^2]{\text{Restriction à la}} \boxed{\mathcal{H}'_{eff}}$

C'est $\mathcal{H}_{eff}$ qui a un sens physique clair, et non $\mathcal{H}'_{eff}$

T-20

Expression de H_0 en seconde quantification

Base d'état à 1 particule adaptée à $\mathcal{H}_0$

$u_{0\vec{k}}(\vec{r})$ spineur propre de $\mathcal{H}_0 = \beta mc^2$
valeurs propres $+\hbar\vec{k}$ pour $\vec{p}$, $+mc^2$ pour $\mathcal{H}_0$

$v_{0\vec{k}}(\vec{r})$ " " $-\hbar\vec{k}$ pour $\vec{p}$, $-mc^2$ pour $\mathcal{H}_0$

(Nombres quantiques de spin sous-entendus)

Expression de $\Psi(\vec{r})$ en seconde quantification

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_k \left(c_{0k} \, u_{0k}(\vec{r}) + b^+_{0k} \, v_{0\bar{k}}(\vec{r}) \right)$$

c_{0k} : op. de destruction d'un e^- $(\hbar\vec{k}, mc^2)$

b^+_{0k} : op. de création d'un e^+ $(\hbar\vec{k}, mc^2)$

Expression de H_0

$$H_0 = E_0 + mc^2 (N_e + N_p)$$

$N_e = \sum_k c^+_{0k} c_{0k}$: Nombre total de e^-

$N_p = \sum_k b^+_{0k} b_{0k}$: Nombre total de e^+

E_0 : énergie du vide (inobservable)

T-21

Multiplicités propres de H_0

Diagramme à double entrée
horizontalement : charge totale $(N_p - N_e)$
verticalement : $mc^2 \times$ nombre total de particule

$5mc^2$		$3e^-, 2e^+$		$3e^+, 2e^-$	
$4mc^2$	$3e^-, 1e^+$		$2e^+, 2e^-$		$3e^+, 1e^-$
$3mc^2$		$2e^-, 1e^+$		$2e^+, 1e^-$	
$2mc^2$	$2e^-$		$1e^+, 1e^-$		$2e^+$
mc^2		$1e^-$		$1e^+$	
0			vide		
	-2	-1	0	$+1$	$+2$

$\xrightarrow{\hspace{1cm}}$
Charge totale

T-22

Exemples de problèmes intéressants

Recherche de H_{eff} dans la multiplicité $1e^-$

Justification des hamiltoniens à 1 particule utilisés en physique basse énergie (physique atomique et moléculaire, physique du solide...)

Recherche de H_{eff} dans la multiplicité $2e^-$

Modification des interactions entre électrons dues à des créations virtuelles de paires.
En étudiant ensuite l'effet des échanges de photons, interactions électromagnétiques

Recherche de H_{eff} dans la multiplicité $1e^- \, 1e^+$

Termes nouveaux apparaissant quand une particule interagit avec son antiparticule
"Force d'annihilation"
Structure fine du positronium
⋮