FIP master 1ère année
lundi 16 octobre 2006

M2 - Théorie quantique des champs

TD 4

Atome d'hydrogène (2ème partie)

Le but de ce problème est de déterminer le spectre de l'atome d'hydrogène dans la théorie de Dirac. Contrairement au problème précédent effectué dans le cadre de la théorie de Klein–Gordon, nous allons nous appuyer sur les résultats connus de la théorie non relativiste. Dans tout ce problème, nous nous plaçons dans la limite où le proton est infiniment lourd, et peut être considéré comme une charge fixe et ponctuelle, choisie pour origine des coordonnées. Le potentiel électrostatique ainsi créé par le proton est

$$V(r) \quad = \quad -\frac{e}{4\pi r}$$

où e est la charge de l'électron ($e < 0$). On notera $\vec{L}$ le moment cinétique orbital et $\vec{J} = \vec{L} + \frac{\vec{\Sigma}}{2}$ le moment cinétique total. La constante de structure fine α est définie dans le système d'unité naturelle par $\alpha = \frac{e^2}{4\pi}$. Un formulaire ainsi qu'un bref rappel de la théorie non relativiste sont donnés à la fin de l'énoncé.

1) On s'intéresse aux solutions stationnaires d'énergie E. Ecrivez l'équation de Dirac pour l'atome d'hydrogène. Montrez qu'elle peut se mettre sous la forme du problème aux valeurs propres

$$H\Psi \quad = \left(\gamma^0\vec{\gamma}.\vec{p} + \gamma^0 m - \tfrac{\alpha}{r}\right)\Psi \quad = E\Psi$$

2) On définit le spineur auxiliaire φ tel que

$$\Psi \quad = \mathcal{P}\varphi \quad = \frac{1}{2m}\left(-\vec{\gamma}.\vec{p} + \gamma^0\left(E + \frac{\alpha}{r}\right) + m\right)\varphi$$

Dans la théorie libre (i.e. $\alpha = 0$), montrez que l'opérateur $\mathcal{P}$ est un projecteur. Quelle est son interprétation ? (facultatif : on pourra regarder son action sur les solutions libres d'énergies positive et négative).

3) Montrez que φ vérifie l'équation suivante

$$\left(\vec{p}^2 + m^2 - i\frac{\alpha}{r^2}\alpha_r - \left(E + \frac{\alpha}{r}\right)^2\right)\varphi \quad = \quad 0$$

où

$$\alpha_r = \gamma_0 \frac{\vec{\gamma}.\vec{r}}{r}$$

4) Montrez que l'opérateur

$$K = \gamma^0 \left(\vec{\Sigma}.\vec{L} + I \right)$$

commute avec l'hamiltonien de Dirac H et avec α_r.

5) Prouvez les relations suivantes

$$\vec{L}^2 = K\left(K - \gamma^0\right)$$
$$K^2 = \vec{J}^2 + \frac{1}{4}$$

En déduire les valeurs propres de K.

6) Montrez que l'équation pour φ peut se récrire $h\, r\varphi = 0$ avec

$$h = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + m^2 + \frac{K^2 - K\gamma^0 - i\alpha_r\alpha - \alpha^2}{r^2} - E^2 - 2E\frac{\alpha}{r}$$

7) Soit l'opérateur $\mathcal{L}$ défini par

$$\mathcal{L} = -K\gamma^0 - i\alpha\alpha_r$$

Montrez que $\mathcal{L}^2 = K^2 - \alpha^2$. En déduire les valeurs propres de $\mathcal{L}$.

8) Vérifiez que h, $\mathcal{L}$, K et J_z commutent. Montrez qu'à l'intérieur de ce sous-espace de fonctions propres, l'équation pour φ peut se récrire comme une paire d'équations découplées du second ordre

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\Lambda\left(\Lambda+1\right)}{r^2} - \frac{2E\alpha}{r} + m^2 - E^2 \right) r\varphi = 0$$

où $\Lambda = \pm\lambda$ sont les valeurs propres de $\mathcal{L}$ ($\lambda > 0$). Déduisez les valeurs propres $E(n_r, \lambda)$ à l'aide des résultats de la théorie non-relativiste.

9) Les fonctions propres déterminées à la question précédente sont-elles fonctions propres de H ?

10) Développez E en puissances de α jusqu'à l'ordre α^4 inclus. Comparez avec le résultat obtenu dans le cas de Klein–Gordon.

11) *Application numérique* : Calculez la correction relativiste pour les niveaux 1s, 2s, 2p, 3s 3p et 3d. Faites un schéma des niveaux d'énergie avec et sans la correction relativiste.

Rappel sur l'atome d'hydrogène dans le cas non-relativiste

Equation de Schrödinger en présence du potentiel $V(r) = -\frac{e}{4\pi r}$

$$\left(\frac{1}{2m}\vec{p}^2 - \frac{\alpha}{r}\right)\psi \quad = \quad E\psi$$

dans les coordonnées sphériques

$$\vec{p}^2 \quad = \quad -\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\vec{L}^2}{r^2}$$

Les niveaux d'énergie sont donnés par

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\,(n_r + l + 1)} \quad \text{avec} \quad n_r = 0, 1, ...$$

l désigne le moment cinétique orbital de Ψ i.e. $\vec{L}^2\Psi = l(l+1)\Psi$. Les états sont classés suivant leur valeur de $n = n_r + l + 1$, de l et de j (moment cinétique total) : $n\ x_j$ avec $x = s$ pour $l = 0$, $x = p$ pour $l = 1$, $x = d$ pour $l = 2$, ...

Valeurs numériques : masse de l'électron $m \simeq 0.51 MeV$, constante de structure fine $\alpha \simeq 1/137$, énergie de Rydberg $\frac{m\alpha^2}{2} \simeq 13.6 eV$.

Formulaire

Les grandeurs "vectorielles" comme $\vec{\gamma}$ désignent les composantes spatiales. Par exemple

$$\vec{\gamma}\vec{p} \quad = \quad \gamma^1 p_x + \gamma^2 p_x + \gamma^3 p_z$$

Matrices gamma :

$$\begin{aligned} \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} &= 2\eta^{\mu\nu} \\ \gamma^5 &= i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \\ \{\gamma^5, \gamma^\nu\} = 0, &\qquad \gamma_5^2 = I \\ \vec{\Sigma} &= \gamma^0\vec{\gamma}\gamma^5 \end{aligned}$$

Matrices de Pauli :

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

Représentation de Dirac :

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \qquad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$
$$\gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \qquad \vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$$