Relativité et Électromagnétisme : TD n°9
— L7 —

Quadrivecteurs courants en Mécanique quantique.

Sébastien Leurent, Marc Lilley & Sylvain Nascimbène

06 juin 2012

1 Rappels : Courant de probabilité en Mécanique quantique non-relativiste

En mécanique quantique non-relativiste, on dispose d'une densité de probabilité $\rho(\vec{x},t) = |\phi(\vec{x},t)|^2$.

On peut alors rechercher, par analogie avec l'hydrodynamique (où $\vec{\jmath}(\vec{x},t) = \rho(\vec{x},t)\vec{v}(\vec{x},t)$), un courant $\vec{\jmath}(\vec{x},t)$ qui vérifie les deux propriétés suivantes :

$$\langle \vec{v}(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \vec{\jmath}(\vec{x},t) \mathrm{d}^3\vec{x} \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\jmath} = 0 \tag{2}$$

1. Pour l'équation de Schrödinger

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\,\hbar} H\phi \qquad\qquad H = -\hbar^2 \frac{\Delta}{2m} + V(\vec{x}) \tag{3}$$

   montrer qu'une solution naturelle de (1) est donnée par

$$\vec{\jmath} = \frac{\hbar}{im} \phi^* \vec{\mathrm{grad}}\,(\phi) \tag{4}$$

2. En utilisant une intégration par partie, trouver une autre solution de (1), telle que $\vec{\jmath}$ soit réel.
3. Vérifier alors que (2) est satisfaite.
4. En déduire que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\vec{x},t) \mathrm{d}^3\vec{x} = 0 \tag{5}$$

Remarque : On peut aussi vérifier que l'équation de Schrödinger est l'équation du mouvement associée au Lagrangien

$$\mathcal{L}(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{x},t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \hbar^2 \frac{\Delta}{2m} - V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x},t) \mathrm{d}^3\vec{x} \tag{6}$$

La loi de conservation (2) peut alors être obtenue en appliquant le Théorème de Noether, ayant remarqué que $\mathcal{L}$ est invariant par la transformation

$$\phi \to e^{i\alpha}\phi \tag{7}$$

2 Particules relativistes de spin zero : Équation de Klein-Gordon

L'équation de Klein-Gordon remplace la relation de dispersion newtonnienne $E = \frac{p^2}{2m}$ (qui sous-tend l'équation (3)) par l'équation relativiste $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$. En l'absence de potentiel on obtient

$$\left(\Box + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\phi(\vec{x},t) = 0. \tag{8}$$

Cette équation est explicitement invariante par changement de référentiel inertiel si l'on suppose que ϕ est un invariant relativiste (un scalaire de Lorentz).

On va montrer que dans ce cadre, il est possible, au prix d'une re-définition de ρ, de ré-écrire (2) sous la forme

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \tag{9}$$

$$\text{où } j^\mu = (\rho\ c, \vec{j}) \qquad \text{est un 4-vecteur contravariant} \tag{10}$$

1. En mécanique quantique non-relativiste, la définition de $\rho(\vec{x},t) = |\phi(\vec{x},t)|^2$ était intimement liée à la définition du produit hermitien $\langle\phi|\psi\rangle = \int \phi^*\psi \mathrm{d}^3\vec{x}$.
   Serait-il cohérent de conserver cette définition du produit scalaire dans le cadre de l'équation de Klein-Gordon ?
   En déduire que ρ ne saurait être défini par $\rho(\vec{x},t) = |\phi(\vec{x},t)|^2$.
2. En s'inspirant du courant $\vec{j}$ de la première partie, écrire un quadrivecteur contravariant $j^\mu = (\rho, \vec{j})$ tel que $\vec{j} = \frac{\hbar}{2im}\left(\phi^* \overrightarrow{\mathrm{grad}(\phi)} - \overrightarrow{\mathrm{grad}(\phi^*)}\ \phi\right)$.
3. Vérifier que (9) est satisfaite.

Au vu de la relation entre densité de probabilité et produit hermitien, il est naturel de considérer le produit hermitien

$$\langle\phi|\psi\rangle = \frac{i\hbar}{2m}\int_{\mathbb{R}^3}\left(\phi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\partial\phi^*}{\partial t}\psi\right). \tag{11}$$

4. Montrer qu'un tel choix de produit hermitien est raisonnable dans la mesure où si $\phi(\vec{x},t)$ et $\psi(\vec{x},t)$ sont solutions de l'équation de Klein-Gordon, alors leur produit hermitien est indépendant du temps.

Dans la limite non-relativiste, la relation de dispersion devient $E = mc^2 + \frac{p^2}{2m}$, ce qui diffère de la relation de dispersion non-relativiste par $E \rightsquigarrow E + mc^2$.

Dans la substitution canonique $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ que nous utilisons, on s'attend à ce que $E \rightsquigarrow E+mc^2$ corresponde à $\psi \rightsquigarrow e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t}\psi$.

5. Montrer qu'au premier ordre non-trivial dans la limite non-relativiste, si ϕ est ψ sont reliés par

   $$\phi(\vec{x},t) = e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t}\psi(\vec{x},t), \tag{12}$$

   alors $\phi(\vec{x},t)$ est solution de l'équation de Klein-Gordon si et seulement si $\psi(\vec{x},t)$ est solution de l'équation de Schrödinger.
6. Dans la limite non-relativiste, retrouver la densité de probabilité de la mécanique quantique non-relativiste comme limite du ρ que vous venez de définir dans le cadre de l'équation de Klein-Gordon.

Remarques :

1. Comme pour l'équation de Schrödinger, ce courant aurait aussi pu être obtenu à partir d'un théorème de Noether, en remarquant que la densité de lagrangien

$$\mathcal{L} = \phi^* \left(\Box + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \phi \tag{13}$$

   est invariante par $\phi \to e^{i\alpha}\phi$

2. Physiquement, ρ n'étant pas nécessairement positif, son interprétation comme densité de probabilité n'est pas a priori évidente....

3 Particules de spin $1/2$: Équation de Dirac

Pour surmonter les difficultés physiques d'interprétation de l'équation Klein-Gordon, on rappelle que Dirac introduisit une équation d'ordre 1, mais avec un fonction d'onde vectorielle dont les quatres composantes satisfont toutes l'équation (8).

L'équation de Dirac s'écrit

$$-\frac{\partial \Psi}{\partial t} = c\ \vec{\alpha} \cdot \vec{\text{grad}}(\Psi) + i\frac{mc^2}{\hbar}\beta\Psi \tag{14}$$

ou de manière équivalente $-i\not{\partial}\Psi + \frac{mc}{\hbar}\Psi = 0$, où $\not{a} \equiv a_\mu \gamma^\mu$, avec $\gamma^\mu \equiv (\beta, \beta\vec{\alpha})$ où $\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$ est un ensemble de 3 matrices de taille 4×4, et $\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ et une matrice de taille 4×4.

On cherche à définir, comme précédemment, un courant de probabilité dans le cadre de l'équation de Dirac.

1. L'équation de Dirac étant une équation différentielle d'ordre un sur des fonctions d'onde $\Psi(\vec{x}, t)$ à plusieurs composante (quand $\vec{x}$ et t sont fixés, $\Psi(\vec{x}, t)$ est un vecteur à quatre composantes), écrire de la façon la plus simple possible la normalisation d'une fonction d'onde et le produit hermitien $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$ entre deux états.
2. En déduire une expression naturelle pour la densité de probabilité ρ.
   Cette densité est-elle réelle ? est-elle positive ?
3. Pour une fonction d'onde solution de l'équation de Dirac, calculer $\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}$ et en déduire $\vec{j}$ tel que (2) soit satisfaite.

On souhaite désormais montrer que $j^\mu = (\rho\ c, \vec{j})$ est un quadrivecteur contravariant.
Sous les transformations de Lorentz, $\Psi(\vec{x}, t)$ se transforme [1] selon

$$\Psi'(\vec{x}', t') = S(\Lambda)\Psi(\vec{x}, t) \tag{15}$$

où $S(\Lambda)$ est une matrice de taille 4×4 qui dépend de la transformation de Lorentz considérée (mais pas de x^μ).

1. On appelle "spineurs de Dirac" les objets qui, sous les transformations de Lorentz, se transforment de la même façon que Ψ, par multiplication par la matrice $S(\Lambda)$.

4. Montrer que pour que l'équation de Dirac ait la même forme dans tous référentiels, $S(\Lambda)$ doit satisfaire l'équation

$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^{\mu}S(\Lambda) = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}\gamma^{\nu}. \tag{16}$$

On va maintenant exprimer une solution de (16). On explicitera une solution uniquement pour les transformations de Lorentz infinitesimales (qui engendrent toutes les transformations de Lorentz directes orthochrones).

Pour une telle transformation de Lorentz infinitésimale arbitraire $x'^{\mu} \to x^{\mu} + \omega^{\mu\nu}x_{\nu}$ sous la forme

$$\Lambda^{\nu}{}_{\mu} = \delta^{\nu}{}_{\mu} + \omega^{\nu}{}_{\mu}, \tag{17}$$

on écrit la matrice $S(\Lambda)$ sous la forme

$$S = 1 - \frac{i}{2}\omega_{\mu\nu}\Sigma^{\mu\nu} \tag{18}$$

5. Écrire l'équation (16) comme une equation sur $\Sigma^{\mu,\nu}$.
   En admettant que les matrice $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}]$ vérifient

$$[\sigma^{\mu\nu}, \gamma^{\rho}] = -4ig^{\mu\rho}\gamma^{\sigma} \tag{19}$$

$$(\sigma^{\mu\nu})^{\dagger} = \gamma^{0}\sigma^{\mu\nu}\gamma^{0} \tag{20}$$

   exhiber une solution de (16).
6. En utilisant cette définition de $S(\Lambda)$, étudier la façon dont se transforme $\Psi^{\dagger}$ par transformation de Lorentz.
7. En déduire que $j^{\mu} = (\rho\ c, \vec{j})$ est bien un quadrivecteur contravariant.