

*République Algérienne Démocratique et Populaire*  
*Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche*  
*Scientifique*

UNIVERSITÉ Dr. TAHAR MOULAY SAÏDA

FACULTÉ DES SCIENCES

Département de physique



## MÉMOIRE

*Présenté en vue de l'obtention du diplôme de*

## **MASTER**

Spécialité : PHYSIQUE NUMERIQUE

par :

*Mahsar Zahira*

Sur le thème :

*Résolution numérique de l'équation de Dirac via  
un potentiel coulombien*

*Soutenance prévue le 09/05/2017 devant le jury :*

*Mr Lasri boumedienne*

*Pr (Université de Saïda)*

*Président*

*Mr Smail Kouidri*

*MC (Université de Saïda)*

*Rapporteur*

*Mr Boudali abk*

*MC (Université de Saïda)*

*Examineur*

*Mr Doumi Bendouma*

*MC (Université de Saïda)*

*Examineur*

*Année Universitaire 2016-2017*

# Remerciements

*Merci à **Dieu** qui nous a donné la force de  
Terminer notre formation.*

*Mes premiers remerciements les plus sincères vont  
D'abord à nos chers parents. Je remercie  
Aussi notre encadreur « **Mr.smaïl kouïdri** » qui m'as  
Accompagné tout au long de notre travail de recherche.  
Mes remerciements vont également à tous les membres  
Du jury et à tous ceux qui ont participé de près ou  
De loin à l'élaboration de notre mémoire.*



# Dédicace

*A mon cher père et ma chère mère*

*« Dieu vous protège »*

*A me chers frères*

*A tous mes oncles et tantes*

*A tous mes proches*

*A tous mes amis*

*A tous ce que j'aime*

*Ce mémoire leur est dédiée*

# *Table des matières*

<b>Remerciement</b>	
<b>Dédicaces</b>	
<b>Introduction général</b>	1

## **Chapitre I: La source de l'équation de Dirac**

I.1.Introduction	5
I.2.Formalisme	6
I.3 Equation de Schrödinger	7
I.4.les moments conjugués	8
I.5.Résolution de l'équation de Schrödinger	9
I.5.1 Séparation des variables	9
I.6.Théorie de la relativité	11
I.6.1 L'espace de Minkowski	11
I.6.2Géométrisation de la physique relativiste	12
I.6.3 quadrivecteur	15
I.7.Métrie de Minkowski	16
I.8. Equation de Klein-Gordon	16
I.8.1 Son courant relatif	17
I.8.2 Analyse de l'équation de Klein-Gordon	18
I.9.Conclusion	20
Références	21

## **Chapitre II: Equation de Dirac de l'antimatière**

II.1. Introduction	22
II.2. La première démarche	22
II.3.Développement des fonctions	23
II.4. Le courant associé	25
II.5.La solution de l'équation de Dirac	27
II.6.La deuxième démarche	29
II.7.La forme covariante de l'équation de Dirac	31
II.8.La transformation de l'équation de Dirac	34
II.8.L'étude des particules libres	36
II.9.L'interprétation de la solution d'énergie négative	40
II.10.conclusion	42
Références	44

## **Chapitre III : Résolution numérique de l'équation de Dirac**

III.1. Introduction	45
III.2. Méthode de calcul	45
III.3.Résolution numérique	48
III.4.Résolution de l'équation de Dirac pour une particule libre	48
III.5.Interprétation des résultats pour le cas d'un potentiel coulombien	52
III.6.Organigramme de calcul	56
III.7.Résolution de l'équation de Dirac d'une manière générale	57
III.8.Conclusion	63
Références	63
Appendice	64
Conclusion générale	66
Références	65

# Introduction générale

Ce travail entre dans le cadre de préparation d'un diplôme de master en physique numérique. Une option déjà nouvelle pour notre université ces dernières années ou nous espérons qu'elle va réussir *via* sa formation qui est riche en modules indispensables pour comprendre ce mystère univers en se basant sur la fameuse théorie dite théorie quantique des champs.

La théorie quantique des champs joue un rôle primordial en physique générale. Elle a depuis presque un siècle accumulé des succès considérables tant dans le domaine de la physique théorique que dans le domaine de la physique des particules. Elle a permis l'unification, en une seule théorie, de presque toutes les interactions liant les objets physiques entre eux, aussi bien les interactions fondamentales à caractère électromagnétique, nucléaire forte, nucléaire faible et gravitationnelle. Elle a été vérifiée avec beaucoup plus de précision de toute l'histoire de la physique et elle n'a jamais été mise en défaut selon les expériences particulières en physique des particules [1].

Avec la relativité générale, qui traite la gravitation d'une manière systématique. Elles forment les deux piliers parallèles de la physique générale qui expliquent aussi bien tous les phénomènes connus dans notre vie quotidienne en allant des atomes aux étoiles c'est-à-dire de l'infiniment petit à l'infiniment grand.

Notre but principal n'est pas de présenter tous ces phénomènes d'une manière quantitative mais d'expliquer comment ça marche. La théorie quantique ne s'est pas élaborée en un jour et beaucoup de travaux ont eut lieu de la part de millier de chercheurs, encore maintenant, sur ses prolongements, ses fondements

et même sa compréhension [2]. Cela seul montre combien ce monde microscopique est complexe et mystérieux.

Nous essayerons d'aborder tous les aspects touchés par la physique quantique, depuis l'équation de Schrödinger jusqu'à l'équation de Dirac, en passant par l'équation de Klein Gordon. Nous mettrons l'accent principal, dès le début, sur la compréhension de beaucoup de phénomènes telle que le domaine de la validité de l'équation de Schrödinger, de Klein Gordon toute en jetant les bases qui ne sont pas indispensables pour manipuler les concepts de cette nouvelle physique quantique.

Nous pensons que cette présentation se veut abordable pour tous les lecteurs que se soit étudiant de notre université de Saida ou d'autres. Bien sûr toute en se basant sur des formules mathématiques inspirées d'un langage capable de nous décrire toute les informations possibles de tel ou tel phénomène.

Alors revenons à notre travail de master qui se base principalement sur la résolution de l'équation de Dirac. Cette fameuse équation qui a bouleversée toute la physique quantique. Elle représente une équation d'onde relativiste dérivée par le physicien britannique Paul Dirac en 1928. Elle décrit tous les particules de spin  $\frac{1}{2}$  telles que les électrons et les quarks.

Elle impliquait également l'existence d'une nouvelle forme de matière appelée antimatière. Elle fourni également une justification théorique pour l'introduction de plusieurs fonctions d'ondes composantes dans la théorie phénoménologique de Pauli; Les fonctions d'onde dans la théorie de Dirac sont des vecteurs à quatre composantes complexes (connus sous le nom de bispineurs), dont deux ressemblent à la fonction d'onde de Pauli dans la limite

non relativiste, contrairement à l'équation de Schrödinger qui décrit les fonctions d'onde d'une seule valeur complexe.

Elle se réduit à l'équation d'Hermann Weyl pour décrire les particules sans masse. Sa proposition par Dirac [3] été faite pour expliquer le comportement de l'électron en mouvement relativiste en premier lieu et de permettre ainsi de traiter l'atome d'une manière conforme à la relativité en second. L'idée de Dirac était d'introduire des corrections relatives au problème des spectres atomiques. Bien que les intentions originales de Dirac aient été satisfaites, son équation avait des implications beaucoup plus profondes pour la structure de la matière et a introduit de nouvelles classes d'objets mathématiques qui sont maintenant des éléments essentiels de la physique fondamentale.

Sa résolution numérique à une dimension ou à deux dimensions reste un problème très important intervenant dans de nombreux calculs de physique quantique, principalement dans le cadre de la physique des particules. De manière générale, la recherche des états propres repose principalement sur la méthode utilisée (analytique ou numérique).

La méthode présentée ici [1-2- 3] permet un gain d'efficacité très important, car le nombre d'itérations suffisent à donner l'énergie avec une précision bien déterminée. Elle constitue un outil extrêmement performant.

Ce manuscrit est organisé comme suit. Le chapitre I est un préliminaire. On commencera par présenter l'équation de Schrödinger d'une manière équation du mouvement déduite de la minimisation de l'action qui porte une densité lagrangienne, puis afin de motiver notre démarche nous allons présenter la densité hamiltonienne sous une forme quantifiée basée sur des opérateurs agissant sur un espace dit espace de Fock.

Nous allons aussi passer à travers des stations qui nous conduisent vers une équation déduite selon le principe d'équivalence et qui sert à étudier des particules relativistes ou l'énergie au repos n'est plus nulle.

Dans le chapitre II l'objectif est de construire une équation qui répond aux questions soulevés par Schrödinger et Klein Gordon. Nous allons établir une fameuse équation qui a vraiment bouleversée toute la physique de l'époque dite équation de Dirac.

Le chapitre III consiste à nous convertir tous ce que nous allons le voir aux chapitres II à des équations numériques inspirées par des programmes écrit en Fortran 77, où nous allons étudier notre particule *via* son potentiel qui est de type Coulombien.

Nous terminerons notre travail par une conclusion générale où nous donnerons un flash sur tous ce que nous avons fait aux chapitres précédents.

## Références

- [1] Polycopie en préparation 'Théorie quantique et renormalisation' S. Kouidri.
- [2] B F Samsonovyz *x*, A A Pecheritsink, E O Pozdeevak and M L Glasser European Journal of Physics 24 (2003) 435-441
- [3] The Quantum Theory of the Hydrogen Atom Felix Nendzig January 31, 2014



# *CHAPITRE I*

*La source de l'équation*

*De Dirac*

## I.1 Introduction

Le premier objectif de ce chapitre est d'exposer succinctement quelques notions de base sur : comment réécrire l'équation de Schrödinger et l'équation de Klein Gordon dans le langage de la théorie quantique des champs en s'inspirant des équations d'Euler Lagrange déduite de la minimisation de l'action. Il s'agira d'un survol, et la grande majorité du formalisme sera donné avec démonstration et avec discussion détaillé en se basant sur des étapes cruciales des débuts de la physique quantique. Nous nous insisterons plutôt sur les concepts de base qui vont nous servir par la suite aux chapitres qui suit.

Nous introduirons des notions de base, comme celles de particule quantique ou de niveau d'énergie, qui reviendront de façon récurrente tout au long de notre travail. Nous nous appuierons sur la densité Hamiltonienne, qui permet d'expliquer de façon simple et convaincante la notion de quantification de l'hamiltonien totale qui s'exprime *via* les opérateurs de création et d'annihilation agissant sur un espace de Fock [1-4].

Dans un premier temps, nous commencerons notre travail par l'équation de Schrödinger en théorie quantique des champs. Pour cela nous allons essayer de la quantifier en la considère comme une équation de champ ordinaire, en partant d'un formalisme lagrangien basé sur la densité lagrangienne.

Dans un second temps, nous traiterons les champs de type scalaire obéissant à l'équation dite équation de Klein-Gordon. Nous en donnerons ici un bref aperçu.

## I.2 Formalisme

En partant de la densité lagrangienne qui s'écrit :

$$L = i\hbar\psi^*\dot{\psi} - \hbar^2 \frac{\vec{\nabla}\psi^*\vec{\nabla}\psi}{2m} - V(x)\psi^*\psi \quad (\text{I-1})$$

Où  $\psi$  est un champ scalaire complexe  $V(x)$  est le potentiel du système.

Et en utilisant les équations d'Euler Lagrange *via*  $\psi$  et  $\psi^*$ , et les équations donnant les moments conjugués  $\pi_\psi$  et  $\pi_{\psi^*}$ , nous obtenons:

$$\pi_\psi = \frac{\partial L}{\partial(\partial_0\psi)} = i\hbar\psi^* \quad (\text{I-2})$$

$$\pi_{\psi^*} = \frac{\partial L}{\partial(\partial_0\psi^*)} = 0 \quad (\text{I-3})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_\mu \left( \frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu\psi)} \right) - \frac{\partial L}{\partial\psi} = 0 \\ \partial_\mu \left( \frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu\psi^*)} \right) - \frac{\partial L}{\partial\psi^*} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{I-4})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_\mu \left( \frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu\psi)} \right) - \frac{\partial L}{\partial\psi} = 0 \\ \partial_\mu \left( \frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu\psi^*)} \right) - \frac{\partial L}{\partial\psi^*} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{I-5})$$

En partant de l'équation (I-4), nous aurons :

$$\partial_0 \left( \frac{\partial L}{\partial(\partial_0\psi)} \right) - \partial_i \left( \frac{\partial L}{\partial(\partial_i\psi)} \right) - \frac{\partial L}{\partial\psi} = 0 \quad (\text{I-6a})$$

$$i\hbar\dot{\psi}^* + \vec{\nabla} \left[ \frac{-\hbar}{2m} \nabla\psi^* \right] + V(x)\psi^* = 0 \quad (\text{I-6b})$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2\psi^* + V(x)\psi^* = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \quad (\text{I-6c})$$

De la même manière l'équation (I-5) donne:

$$\partial_0 \left( \frac{\partial L}{\partial(\partial_0\psi^*)} \right) - \partial_i \left( \frac{\partial L}{\partial(\partial_i\psi^*)} \right) - \frac{\partial L}{\partial\psi^*} = 0 \quad (\text{I-7a})$$

$$0 + \vec{\nabla} \left[ \frac{-\hbar}{2m} \nabla \psi \right] + V(x)\psi - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = 0 \quad (\text{I-7b})$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{I-7c})$$

Qui n'est autre que l'équation de Schrödinger.

### I.3 Equation de Schrödinger

Généralement en mécanique quantique non-relativiste, on décrit le mouvement d'une particule libre sans potentiel de masse  $m$ , d'impulsion  $\vec{p}$ , d'énergie  $E$  et de fonction d'onde  $\psi(t, \vec{r})$  par une équation dynamique dite l'équation de Schrödinger dépendante du temps où équation de Schrödinger en représentation de Heisenberg :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{I-8})$$

En effet à partir de la mécanique classique le mouvement d'une particule libre de masse  $m$ , d'impulsion  $\vec{p}$  et d'énergie cinétique  $E$  est régit par :

$$\frac{\vec{p}^2}{2m} = E \quad (\text{I-9})$$

Alors en se basant sur le principe d'équivalence qui nécessite de remplacer les grandeurs physiques par des opérateurs obéissant à la première quantification

$$[x, \vec{p}] = i\hbar \quad (\text{I-10a})$$

$$\vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla} \text{ et } E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (\text{I-10b})$$

Où les fonctions d'ondes sont de type analytique.

L'application de ces opérateurs à la fonction d'onde  $\psi(t, \vec{r})$  donne la fameuse équation :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{I-4})$$

Qui se simplifie en utilisant le système unité  $\hbar = c = 1$ .

L'équation de Schrödinger devienne alors:

$$-\frac{1}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi = i \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{I-11})$$

Et à partir de cette équation on peut obtenir l'équation dite de continuité densité –courant, reliant la densité de probabilité  $\rho$  au vecteur courant  $\vec{j}$ , donné par :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (\text{I-12})$$

Où  $\rho$  et  $\vec{j}$  sont donnés par :

$$\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2$$

$$\vec{j} = + \frac{i}{2m} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

### I.4 Les moments conjugués

La détermination des moments conjugués repose sur les équation dite de Hamilton où leurs forme donne les quantités  $\pi_\psi$  et  $\pi_{\psi^*}$ , qui nous aide par la suite à la détermination de la forme de la densité hamiltonienne.

La densité hamiltonienne s'écrit :

$$H = \pi_\psi \partial_0 \psi + \pi_{\psi^*} \partial_0 \psi^* - L \quad (\text{I-13})$$

$$H = i\hbar \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - i\hbar \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi + \hbar^2 \frac{\vec{\nabla} \psi^* \vec{\nabla} \psi}{2m} - V(x) \psi^* \psi \quad (\text{I-14a})$$

$$H = \hbar^2 \frac{\vec{\nabla} \psi^* \vec{\nabla} \psi}{2m} - V(x) \psi^* \psi \quad (\text{I-14b})$$

L'hamiltonien total du champ de Schrödinger s'obtient en intégrant sa densité sur toute l'espace, en effet :

$$H_{total} = \int \mathcal{H} d^3x \quad (\text{I-15})$$

En passant à l'espace des phases inspirés par les vecteurs d'onde  $\vec{k}$ , *via* la transformée de Fourier :

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k a(k) e^{-i(\omega_k t - \vec{k}\vec{x})} \quad \text{avec } \hbar\omega_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{I-16})$$

Injectant l'équation (I-11) dans (I-10), nous obtenons :

$$H = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \omega_k a^*(k) a(k) \quad (\text{I-17})$$

Il est bien entendu, que

$$\int d^3 x e^{-i\vec{k}\vec{x}} = (2\pi)^3 \delta^3(\vec{k}) \quad (\text{I-18})$$

Où  $\delta^3(\vec{k})$  est la fonction de Dirac.

## I.5 Résolution de l'équation de Schrödinger

On considère une particule de masse  $m$  dans une zone où règne un potentiel indépendant du temps  $V(x)$  et on se propose de déterminer sa fonction d'onde  $\psi(x, t)$ .

### I.5.1 Séparation de variable

L'équation (I-7c) déjà donne s'écrit par la substitution suivante :

$$\psi(x, t) = \varphi(x)\chi(x) \quad (\text{I-20a})$$

$$i\hbar\psi \frac{dX}{dt} = \frac{-\hbar^2}{2m} X\Delta\psi + V\psi X \quad (\text{I-20b})$$

Divisions les deux membres de cette équation par le produit  $X\psi$ , on obtient l'égalité suivante :

$$i\hbar \frac{1}{X} \frac{dX}{dt} = \frac{\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi}{\psi} \quad (\text{I-21})$$

Le membre de gauche est une fonction du temps, alors que le deuxième membre est une fonction de l'espace. Pour que cette égalité soit satisfaite il faut que ces deux membres soient égaux à une constante près.

$$i\hbar \frac{dX}{dt} = E X \quad (\text{I-22})$$

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi = E \psi \quad (\text{I-23})$$

La première équation se résout facilement:

$$X(t) = X(0) e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \quad (\text{I-24})$$

Ce qui donne pour  $\psi(x, t)$

$$\psi(x, t) = \varphi(r) e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \quad (\text{I-25})$$

L'équation de Schrödinger (I-17) représente le régime stationnaire, ou état statique de  $\psi(x, t)$ .

Même si cette équation décrit assez bien les électrons dans les atomes, les physiciens se heurtent à des phénomènes incompris comme l'effet Zeeman anormal, l'expérience de Stern et Gerlach et la structure hyperfine des raies spectrales qui ne trouvent une explication satisfaisante que par l'introduction d'une propriété supplémentaire de l'électron : le spin, ou moment cinétique intrinsèque. Il faut donc ajouter ce terme supplémentaire dans l'équation de Schrödinger pour prendre en compte cette variation d'énergie d'où équation de Pauli pour le calcul des spectres atomique [3].

Mais avant d'aller à cette affirmation, on devrait passer par une nouvelle station dite aussi équation de Klein Gordon car si nous basons sur l'équation de Schrodiner elle décrit que les particules non relativistes, c'est pour ça nous disons que l'équation est non relativiste, pour passer au cas relativiste et

travailler avec des vitesses proches de la vitesse de la lumière, nous devons reformuler notre lagrangien susceptible à donner une équation apte à décrire les particules relativiste. Pour cela essayons de combiner notre mécanique quantique décrite par Schrödinger et la relativité générale formulée par Albert Einstein.

## I.6 Théorie de la relativité

### I.6.1 L'espace de Minkowski

Du nom de son inventeur Hermann Minkowski, est un espace mathématique, et plus précisément un espace affine pseudo-euclidien à quatre dimensions, modélisant l'espace-temps de la relativité restreinte : les propriétés géométriques de cet espace correspondent à des propriétés physiques présentes dans cette théorie, la réciproque n'étant pas vraie car le réalisme physique n'est pas entièrement décrit par cette géométrisation, avant la physique classique est également géométrisée, et ce depuis Isaac Newton, voire avant ; l'intérêt de cette géométrisation de la relativité restreinte est dans le fait que le temps lui-même y est représenté comme indissociablement lié à l'espace matériel, que les propriétés abstraites de la relativité restreinte y trouvent une représentation proche de la géométrie euclidienne, et que cela a aidé à la formulation de la relativité générale.

Cet espace a été introduit dès 1905 par Henri Poincaré, soit deux ans avant les publications d'Hermann Minkowski sur ce sujet. La primeur de la découverte est un sujet à débats, mais il semble, d'après certains historiens des sciences, que l'interprétation moderne de cet espace comme espace-temps physique, et non pas convention calculatoire, est une idée de Minkowski, qui abandonna l'éther électromagnétique, à la suite d'Einstein, alors que Poincaré n'y renonça jamais vraiment, considérant que dans un référentiel quelconque les quantités mesurées sont toujours « apparentes », alors que les quantités « réelles » sont mesurées

dans le référentiel de l'éther Poincaré aurait proposé cet espace comme une présentation algébrique et géométrique possible, pratique d'un point de vue calculatoire, mais axiomatique, c'est-à-dire conventionnelle, des propriétés mathématiques liées au principe de relativité et à l'invariance des équations de Maxwell par changement de référentiel inertiel, en privilégiant de manière conventionnelle comme réel le référentiel de l'éther, c'est-à-dire un espace réel qui serait classique.

Seul Hermann Minkowski aurait vu dès 1907 que cet espace était un modèle expérimentable (et pas seulement conventionnel) d'un espace-temps où espace et temps sont liés dans les lois de la mécanique et y développa, entre autres, les conditions de la causalité et de la simultanéité suivant le référentiel de l'observateur. Poincaré se rapprochera de ce point de vue en 1912, dans sa dernière conférence intitulée L'espace et le temps prononcée à Londres, où il exprimera que l'on peut définir un espace-temps à partir du groupe de symétrie des lois de la physique, en posant cette fois le principe de relativité comme une convention

## I.6.2 Géométrisation de la physique relativiste

Les points géométriques représentant les événements physiques sont repérés par quatre coordonnées  $(ct, x, y, z)$  : la coordonnée de temps et les trois coordonnées d'espace. Les repères mathématiques  $y$  représentent les référentiels galiléens, et l'obligation en mathématiques de choisir un repère, pour désigner les points par des coordonnées, correspond à celle, en physique, de choisir un référentiel pour l'observateur, y compris pour le choix de la mesure du temps

Du point de vue du réalisme intuitif, la particularité mathématique de cet espace affine tient à sa distance entre deux points, appelée pseudo-métrique, qui a été construite par Hermann Minkowski pour être invariante par les changements de repère que sont les transformations de Lorentz. La pseudo-

métrique est aussi appelée pseudo-norme quand on n'utilise que l'espace vectoriel sous-jacent à l'espace affine. Cette pseudo-métrique correspond au temps propre entre deux événements qui peuvent être causalement joints, ou correspond à la distance propre entre eux s'ils ne le peuvent pas.

Si on imagine qu'un faisceau lumineux soit émis à l'instant  $t$  et se propage sur l'axe  $x$  à la vitesse constante de la lumière,  $c$  :

$C=x/t$  , qu'on peut aussi écrire sous la forme :  $x=ct$

Dans l'espace-temps de Minkowski , cette équation s'écrit :

$$ct = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (\text{I-26})$$

portant tout le carré pour supprimer de la racine on obtient :

$$(ct)^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

$$(ct)^2 - x^2 - y^2 - z^2 = 0 \quad (\text{I-27})$$

Implicitement, des 1907 le temps joue un rôle sur la géométrie de l'espace, puisqu'il ajoute un supplémentaire à notre équation,  $c^2t^2$  une mesure de l'espace-temps.

Considérons deux des événements de coordonnées  $(x_1y_1z_1)$  et  $(x_2y_2z_3)$  et remplaçons les variables dans l'équation(I-21) :

$$(\Delta s)^2 = c^2(t_2 - t_1)^2 - [(x_2 - x_1)^2 - (y_2 - y_1)^2 - (z_2 - z_1)^2] \quad (\text{I-28a})$$

Et on posant que :

$$\Delta t = t_2 - t_1 \quad (\text{I-28b})$$

$$\Delta x = x_2 - x_1 \quad (\text{I-28c})$$

$$\Delta y = y_2 - y_1 \quad (\text{I-28d})$$

$$\Delta z = z_2 - z_1 \quad (\text{I-28e})$$

Donc la pseudo-métrique, notée  $\Delta s$  et définie par :

$$\Delta s^2 = -c^2(\Delta t)^2 + (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2 \quad (\text{I-29})$$

Ou bien :

$$\Delta s^2 = c^2(\Delta t)^2 - (\Delta x)^2 - (\Delta y)^2 - (\Delta z)^2 \quad (\text{I-30})$$

suivant la convention de signes  $(-, +, +, +)$  ou  $(-, +, +, +)$  choisie Cette définition rend la pseudo-métrique identique à l'intervalle d'espace-temps qui est l'invariant relativiste par changement de référentiel galiléen Un événement étant donné, l'ensemble des événements physiquement joignables dans le futur et de ceux du passé à partir desquels on pouvait joindre l'événement donné, forme un cône dans l'espace de Minkowski, appelé cône de lumière, et permettant des raisonnements purement géométriques par des dessins appelés diagrammes de Minkowski.

Cet espace est pseudo-euclidien : bien que la métrique ne soit qu'une pseudo-métrique, les géodésiques  $y$  sont les droites, ce qui fait dire que cet espace est plat comme dans un espace euclidien. Les inégalités triangulaires qui y sont valables montrent qu'un segment est le chemin le plus long entre deux points, ce qui est une nette différence avec la géométrie euclidienne.

Dans cet espace, la dimension relative au temps peut être considérée comme un nombre imaginaire, alors que les trois autres coordonnées (spatiales) sont toujours des nombres réels : ce choix modifie l'écriture de la pseudo-norme et la présentation des calculs, sans apporter plus de simplicité.

Un référentiel de l'espace (affine) de Minkowski est un référentiel galiléen pour un observateur : choix d'un lieu et moment de référence, choix d'axes

tridimensionnels et d'un temps. Un observateur, et son référentiel, étant plongé dans cet espace, il repère un événement (point de l'espace-temps) par ses coordonnées temporelle ( $t$ ) et spatiales ( $x, y, z$ ) : un point  $M$  est noté par  $M(ct; x; y; z)$  ou bien  $M(x^0, x^1, x^2, x^3)$  est-ce sont des quadrivecteur.

## I.6.3 Quadrivecteur

Dans La théorie de la relativité (restreinte, puis générale) élaborée par Einstein amène à considérer les trois coordonnées d'espace (par exemple hauteur, largeur, profondeur) et le temps comme formant un tout indissociable. Dans le cas de la relativité restreinte, l'espace plat est l'espace-temps de Minkowski à quatre dimensions.

En relativité restreinte, un quadrivecteur est alors un vecteur de l'espace-temps de Minkowski de dimension quatre, avec quatre coordonnées : cela signifie qu'en cas de changement de référentiel, les changements des coordonnées se font par les transformations de Lorentz (c'est ce que l'on nomme la covariance des coordonnées), ce qui est équivalent à l'invariance de la pseudo-norme par changement de référentiel. Exprimer dans une base vectorielle donnée de l'espace-temps de Minkowski, on parle de quadrivecteurs contravariants.

À partir de cette base et du produit scalaire de l'espace de Minkowski, on construit une autre base vectorielle, dite covariante, permettant de d'écrire le produit scalaire de manière allégée c'est-à-dire exprimés dans cette seconde base, les quadrivecteurs sont dits covariants, En relativité générale, un quadrivecteur est un quadrivecteur de l'espace tangent de la variété de dimension quatre de ce théorie caractérisé par l'espace du temps et trois composants de l'espace euclidien  $x, y, z$  et notée :

$$\begin{cases} x^0 = ct \\ x^1 = x \\ x^2 = y \\ x^3 = z \end{cases} \quad (\text{I-31})$$

### I.7 Métrique de Minkowski

En notant  $\mu$  et  $\nu$  des indices d'espace-temps à 4 dimensions la métrique de Minkowski s'écrit, avec la signature  $(-,+,+,+)$

$$\eta_{\mu\nu} \equiv \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{I-32})$$

ou bien sous forme différentielle :

$$ds^2 = \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = -c^2 dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (\text{I-33})$$

Une autre possibilité est de choisir la signature  $(+,-,-,-)$  :

$$\eta_{\mu\nu} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{I-34})$$

La forme différentielle est alors :

$$ds^2 = \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 \quad (\text{I-35})$$

### I.8 Equation de Klein-Gordon

Alors que la mécanique quantique traditionnelle se base principalement sur le formalisme hamiltonien, c'est le Lagrangien qui joue un rôle central en théorie quantique des champs. Alors partant du lagrangien  $\mathcal{L}$  d'un champ scalaire réel :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial^\mu \varphi \partial_\mu \varphi - \frac{1}{2} m^2 \varphi^2 \quad (\text{I-36})$$

Où  $\varphi(x^\mu)$  est un champ scalaire en utilisant la même démarche décrite au paravent relative à  $\varphi(x^\mu)$ , nous obtenons :

$$\partial_\mu \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} = 0 \quad (\text{I-37a})$$

$$\partial_\mu [\partial^\mu \varphi] + m^2 \varphi \quad (\text{I-37b})$$

$$\square \varphi + m^2 \varphi = 0 \quad (\text{I-38a})$$

$$(\square + m^2) \varphi(x^\mu) = 0 \quad (\text{I-38b})$$

Qui représente l'équation de Klein-Gordon

$\square$  : est l'opérateur d'alembertien

$$\square : \partial^\mu \partial_\mu = \partial^0 \partial_0 + \partial^i \partial_i \quad (\text{I-39a})$$

$$\square : \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 \quad (\text{I-39b})$$

Cette équation est manifestement covariante du fait que l'opérateur  $\square$  est invariant et que le champ  $\varphi(x^\mu)$  est scalaire.

### I.8.1 Son courant relatif

Le courant induit par l'équation (I-32b) est donné par :

$$J^\mu = \frac{i}{2m} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) \quad (\text{I-40})$$

En effet :

$$\partial_\mu J^\mu = \frac{i}{2m} (\partial_\mu \psi^* \partial^\mu \psi + \varphi \square \psi^* - \partial_\mu \psi \partial^\mu \psi^* + \psi \square \psi^*) \quad (\text{I-41a})$$

$$= \frac{i}{2m} \psi \square \psi^* - \psi^* \square \psi = 0 \quad (\text{I-41b})$$

Où l'on a utilisé l'équation de Klein-Gordon relative à  $\psi$  et  $\psi^*$ .

En posant :  $J^0 = \rho$ , on en deduit facilement que :

$$\frac{d}{dt} \int \rho dV = - \int \vec{J} \vec{ds} = 0 \quad (I-42)$$

En utilisant de théoreme d'orstrogradski qui transforme les integrales surfaces en integrales volume on obtient :

$$\int \vec{J} \vec{ds} = \int \text{div } \vec{J} \, dv \quad (I-43)$$

D'où:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{J} = 0 \quad (I-44)$$

Revenous à l'équation de Klien-Gordon:

$$(\square + m^2) \varphi(x^\mu) = 0 \quad (I-45)$$

Cecé donne :

$$E^2 = p^2 + m^2 \quad (I-46)$$

Et donc

$$E = \pm \sqrt{p^2 + m^2} \quad (I-47)$$

De plus, le calcul du courant sur l'onde :  $\varphi(x) = e^{i(p\vec{x} - Et)}$

Donne :

$$J^\mu = \left( \frac{E}{m}, \frac{\vec{p}}{m} \right) = \frac{p^\mu}{m} \quad (I-48)$$

Et donc  $\rho = E/m$  peut être soit positif soit négatif, tous depend du signe de E.

I.8.2 Analyse de l'équation de Klein-Gordon

Maintenant après avoir déterminé notre fameuse équation *via* les dérivées secondes relatives qui n'est autre que la version relativiste de l'équation de Schrödinger dans le formalisme théorie quantique des champs du fait qu'elle peut être obtenue de la même manière que l'équation de Schrödinger mais en partant cette fois-ci de la relation énergie-impulsion relativiste d'Einstein :

$$p^\mu p_\mu = m^2 \tag{I-49}$$

En passant à la représentation suivante où on remplace les opérateurs impulsions par les dérivées covariantes :

$$p_\mu \rightarrow i\partial_\mu \text{ Avec } \partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left( \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla} \right) \tag{I-50}$$

$$p^\mu \rightarrow i\partial^\mu \text{ Avec } \partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left( \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right) \tag{I-51}$$

On aboutit à l'équation de Klein –Gordon :

$$(\partial^\mu \partial_\mu + m^2)\phi(x) = 0 \equiv (\partial^2 + m^2)\phi(x) = 0 \tag{I-52}$$

Où  $\phi(x)$  est la fonction d'onde de la particule relativiste.

Les solutions de cette équation sont de la forme :

$$\phi(x) = N e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})} \tag{I-53}$$

Avec  $E = \mp \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$  et N est un coefficient de normalisation.

Alors en plus des solutions d'énergie positive l'équation de Klein-Gordon possède aussi des solutions d'énergie négative à laquelle est associée une densité de probabilité  $\rho$  négative donnée par :

$$\rho = i \left( \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \right) = 2E|N|^2 \quad (\text{I-54})$$

Ce qui représente le 1<sup>er</sup> inconvénient le courant associe est donné par :

$$\vec{j} = i(\phi \vec{\nabla} \phi^* - \phi^* \vec{\nabla} \phi) = 2|N|^2 \vec{p} \quad (\text{I-55})$$

Alors une densité de probabilité négative pose un problème pour la physique de l'époque ce qui nous amène à aller à la théorie de Dirac qui se base sur principalement sur l'introduction de la forme antiparticule dans l'ordre de lever cette inconsistance. D'ailleurs ces problèmes d'énergie et de densité de probabilité négative résolus ont conduit P.M.A. Dirac à chercher une nouvelle version dite équation de Dirac, qui représente un point de départ des particules de spin demi entier d'où l'introduction du phénomène de l'antimatière.

Notons que l'équation de Klein-Gordon est valable que pour les particules et les antiparticules scalaires de spin entier en particulier les particules de spin 0.

## I.9 Conclusion

Alors 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 dont le premier est que l'équation de Klein-Gordon 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 et dont le second elle présente des solutions d'énergie négative ce qui a motivé Dirac à réfléchir et à énoncer sa fameuse équation qui sera l'objectif du chapitre II d'où **Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.**

## Références

- [1] Roman Schmied *introduction to Quantum Mechanics* 2012.
- [2] Benbrahim Memoire de master Resolution numérique de l'équation de Klein Gordon 2016
- [3] Polycopie en cours de préparation 'Theorie quantique et renormalisation' S. Kouidri.
- [4] The Quantum Theory of the Hydrogen Atom Felix Nendzig January 31, 2014

A decorative border featuring pink and orange flowers, green leaves, and intricate green vine scrollwork framing the central text.

## *CHAPITRE II*

*Equation de Dirac et  
phénomène de  
l'antimatière*

### **II.1 Introduction**

Maintenant après avoir achevé le chapitre I, nous entamons la partie théorie quantique où nous allons rappeler toutes les expressions vue en théorie quantique des champs par la considération que les fonctions d'onde deviennent des champs d'opérateurs et pas des fonctions analytiques satisfaisant à la première quantification c'est-à-dire ils vont vérifier des règles de commutations et d'anti-commutations obéissant aux systèmes bosoniques et fermioniques d'où la seconde quantification[1-2].

Et avec l'utilisation de la fameuse équation d'Albert Einstein qui exprime la relation fondamentale du carrée de l'énergie en fonction du carrée de l'impulsion toute en fixant l'esprit à travailler avec les matrices de Pauli qui définissent la partie demi entière du moment cinétique de spin.

D'ailleurs cette dernière version à été justifié par l'expérience de Stern et Gerlach qui repose sur le fait qu'un jet d'atomes dans une zone où règne un champ magnétique provoque une division en deux tâches une tâche positive appelé up et une tâche négative appelé down.

Nous en donnerons ici deux démarche.

### **II.2 La première démarche**

Alors en partant de l'équation de Schrödinger qui est simplement une équation non relativiste, l'idée de Dirac est de trouver une équation relativiste pour les électrons libre sans potentiel, dont le processus est de remplacer le terme  $\vec{p}$  par  $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$  et en se reposant sur l'équation relativiste donnant le carré de l'énergie E en fonction du carré de son impulsion.

En se prenant en compte la relation fondamentale d'Albert Einstein et en remplaçant  $\vec{p}$  par  $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$  dans l'équation suivante :

$$\frac{E^2}{c^2} - p^2 = (mc)^2 \quad (\text{II-1})$$

On aura :

$$\left(\frac{E}{c} - \vec{\sigma}\vec{p}\right) \left(\frac{E}{c} + \vec{\sigma}\vec{p}\right) = (mc)^2 \quad (\text{II-2})$$

Ce qui donne :

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar \vec{\sigma}\vec{\nabla}\right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - i\hbar \vec{\sigma}\vec{\nabla}\right) \varphi = (mc)^2 \varphi \quad (\text{II-3})$$

Où  $\varphi$  est la fonction d'onde appelé bispineur.

Cette équation conduit à des dérivées secondes en temps.

### II.3 Développement des fonctions

Ecrivant cette dernière équation en terme de  $\varphi^{(Left)} \equiv \varphi^{(gauche)}$  qui représente la fonction d'onde gauche et  $\varphi^{(Right)} \equiv \varphi^{(droite)}$  qui présente la fonction d'onde droite définit par :

$$\begin{cases} \varphi^{(Left)} = \varphi \\ \varphi^{(Right)} = \frac{1}{mc} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - i\hbar \vec{\sigma}\vec{\nabla}\right) \varphi^{(Left)} \end{cases} \quad (\text{II-4})$$

Et en incluant les deux composante de  $\varphi^{(Left)}$  et  $\varphi^{(Right)}$  on obtient :

$$\begin{cases} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar \vec{\sigma}\vec{\nabla}\right) \varphi^{(Right)} = mc\varphi^{(Left)} \\ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - i\hbar \vec{\sigma}\vec{\nabla}\right) \varphi^{(Left)} = mc\varphi^{(Right)} \end{cases} \quad (\text{II-5})$$

Faisant la somme et la différence ça nous ramène à

$$\begin{cases} i\hbar \vec{\sigma}\vec{\nabla}(\varphi^{(Left)} - \varphi^{(Right)}) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\varphi^{(Right)} + \varphi^{(Left)}) + mc(\varphi^{(Right)} + \varphi^{(Left)}) \\ \hbar \vec{\sigma}\vec{\nabla}(\varphi^{(Right)} - \varphi^{(Left)}) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\varphi^{(Left)} - \varphi^{(Right)}) + mc(\varphi^{(Right)} - \varphi^{(Left)}) \end{cases} \quad (\text{II-6})$$

## Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

---

Posons  $\varphi_A = \varphi^{(Right)} + \varphi^{(Left)}$  (II-7)

$$\varphi_B = \varphi^{(Right)} - \varphi^{(Left)} \quad (II-8)$$

On aboutit à :

$$\begin{pmatrix} -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} & -i\hbar \vec{\sigma} \vec{\nabla} \\ i\hbar \vec{\sigma} \vec{\nabla} & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix} = -mc \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix} \quad (II-9)$$

Où  $\varphi_A$  et  $\varphi_B$  représentent les fonctions à 4 composantes.

Réécrivant la matrice sous la nouvelle forme :

$$M = \begin{pmatrix} -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} & -i\hbar \vec{\sigma} \vec{\nabla} \\ i\hbar \vec{\sigma} \vec{\nabla} & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \end{pmatrix} \quad (II-10)$$

En terme de matrice  $4 \times 4$  on aura :

$$\begin{pmatrix} -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} & -i\hbar \vec{\sigma} \vec{\nabla} \\ i\hbar \vec{\sigma} \vec{\nabla} & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \end{pmatrix} = \hbar \left[ \begin{pmatrix} 0 & -i\vec{\sigma} \vec{\nabla} \\ i\vec{\sigma} \vec{\nabla} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x^0} & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial x^0} \end{pmatrix} \right] \quad (II-11)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma \\ i\sigma & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x^i} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x^0} \quad (II-12)$$

$$= \hbar \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \quad (II-13)$$

Où :

$$\gamma^\mu = \begin{pmatrix} 0 & -i\partial_i \\ i\partial_i & 0 \end{pmatrix}; \gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (II-14)$$

Dénomment les matrices de Pauli dans la dimension 4.

L'équation résultante se simplifié à :

$$\left(\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} + mc\right) \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II-15})$$

Posons  $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_b \end{pmatrix}$  ça nous ramène à la fameuse équation :

$$\left(\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} + mc\right) \Psi = 0 \quad (\text{II-16})$$

Qui représente l'équation de Dirac relative à un système fermionique.

Après avoir défini ces fonctions nous allons passer à déterminer le courant résultant.

#### II.4 Le courant associé

Nous revenons au problème persistant de la densité de probabilité  $\rho$  et du courant  $\mathbf{J}$  qui a laissé Dirac à réfléchir de trouver une équation au premier ordre du temps, alors partant de l'équation de continuité donné par Schrödinger via son développement:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{J}} = 0 \quad (\text{II-17})$$

Notre problème est de trouver une équation similaire, toute en se basant sur l'équation de Dirac :

$$\left(\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} + mc\right) \Psi = 0 \quad (\text{II-18})$$

Et en portant son hermétique conjugué toute en savant que les matrices  $\gamma$  sont hermétique

$$\gamma^{\mu+} = \gamma^\mu \quad (\text{II-19})$$

$$\frac{\partial \Psi^+}{(\partial x^\mu)^*} \gamma^\mu + \frac{mc}{\hbar} \Psi^+ = 0 \quad (\text{II-20})$$

## Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

---

$$\text{Avec } x^\mu = (t, \vec{x}) \quad (\text{II-21})$$

$$x^{\mu*} = (-t, \vec{x}) \quad (\text{II-22})$$

Multipliant l'équation hermitique par  $\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Ça nous conduit :

$$\frac{\partial \Psi^+}{\partial x^i} \gamma^i + \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} \gamma^0 + \frac{mc}{\hbar} \Psi^+ = 0 \quad (\text{II-23})$$

$$\frac{\partial \Psi^+}{\partial x^i} \gamma^i \gamma^0 + \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} (\gamma^0)^2 + \frac{mc}{\hbar} \Psi^+ \gamma^0 = 0 \quad (\text{II-24})$$

Or  $(\gamma^0)^2 = -1$

Et que  $\gamma^i \gamma^0 = -\gamma^0 \gamma^i$

$$-\frac{\partial \Psi^+}{\partial x^i} \gamma^0 \gamma^i + \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} \gamma^0 \gamma^0 + \frac{mc}{\hbar} \Psi^+ \gamma^0 = 0 \quad (\text{II-25})$$

Posons  $\bar{\Psi} = \Psi^+ \gamma^0$  qui présente l'adjoint conjugué de  $\Psi$ , nous pouvons alors réécrire l'équation précédente comme :

$$\frac{-\partial \bar{\Psi}}{\partial x^i} \gamma^i - \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \gamma^0 + \frac{mc}{\hbar} \gamma^0 \bar{\Psi} = 0 \quad (\text{II-26})$$

$$\frac{-\partial \bar{\Psi}}{\partial x^\mu} \gamma^\mu + \frac{mc}{\hbar} \bar{\Psi} = 0 \quad (\text{II-27})$$

Multipliant l'équation de Dirac à gauche par  $\bar{\Psi}$  et faisant la soustraction avec cette dernière équation on obtient :

$$\bar{\Psi} \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi + \frac{mc}{\hbar} \bar{\Psi} \Psi + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x^\mu} \gamma^\mu \Psi - \frac{mc}{\hbar} \bar{\Psi} \Psi = 0 \quad (\text{II-28})$$

$$\bar{\Psi} \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x^\mu} \gamma^\mu \Psi = 0 \quad (\text{II-29})$$

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} (\bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi) = 0 \quad (\text{II-30})$$

Posons :

$$J^0 = \bar{\Psi}\gamma^0\Psi = \Psi^+\gamma^0\Psi \quad (\text{II-31})$$

$$J^i = \Psi^+\gamma^0\gamma^i\Psi \quad (\text{II-32})$$

$$\partial_\mu J^\mu = 0 \Rightarrow \partial_0 J^0 + \partial_i J^i = 0 \quad (\text{II-33})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [\Psi^+(\gamma^0)^2\Psi] + \vec{\nabla}(\Psi^+\gamma^0\gamma^i\Psi) = 0 \quad (\text{II-34})$$

$$\frac{-\partial\Psi^+}{\partial t} \Psi - \vec{\nabla}(J^i) = 0 \Rightarrow \frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J} = 0 \quad (\text{II-35})$$

### II.5 La solution de l'équation de Dirac

Comme pour l'équation de Schrödinger, les solutions les plus simples de l'équation de Dirac sont ceux pour une particule libre. On les considère comme des spineurs constant multiplié par une fonction exponentielle d'une particule libre.

Alors, en partant de l'équation de Dirac et nous tentons à développer cette équation. En la transformant à une équation différentielle du second ordre, ce qui nous amène à l'équation de Klein-Gordon.

$$\left(\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} + \frac{mc}{\hbar}\right)\Psi = 0 \quad (\text{II-36})$$

Multipliant là par  $\gamma^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu}$

$$\gamma^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \left[ \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} + \frac{mc}{\hbar} \right] \Psi = 0 \quad (\text{II-37})$$

$$\left( \gamma^\nu \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} + \frac{mc}{\hbar} \gamma^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \right) \Psi = 0 \quad (\text{II-38})$$

Or  $\gamma^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \Psi = \frac{-mc}{\hbar} \Psi$

## Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

---

$$\left( \gamma^\nu \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \Psi = 0 \quad (1) \quad (\text{II-39})$$

Et comme pour :

$$\left( \gamma^\mu \gamma^\nu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} - \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \Psi = 0 \quad (2) \quad (\text{II-40})$$

$$(1)+(2) \Rightarrow \left( 2\delta^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} - 2 \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \Psi = 0 \quad (\text{II-41})$$

$$\delta^{\mu\nu} = \begin{cases} 1 & \text{si } \mu = \nu \\ 0 & \text{si } \mu \neq \nu \end{cases} \text{ est le symbole de kronker}$$

$$\left( 2 \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} - 2 \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \Psi = 0 \quad (\text{II-42})$$

Ce qui donne facilement

$$\left( \square - \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \Psi = 0 \quad (\text{II-43})$$

Où on a pris la métrique :

$$g^{\mu\nu} = (-1, 1, 1, 1) \quad (\text{II-44})$$

Cette métrique peut prendre la forme suivante :

$$g^{\mu\nu} = (1, -1, -1, -1) \quad (\text{II-45})$$

$$\left( \square + \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \Psi = 0 \quad (\text{II-46})$$

Cette fameuse équation dite de Klein-Gordon a comme solution :

$$\Psi(t, \mathbf{x}) = u_p e^{i(px - Et)/\hbar} \quad (\text{II-47})$$

### II.6 La deuxième démarche

La deuxième démarche repose sur l'écriture directe de l'équation de Dirac sous la forme suivante :

$$\hat{H}\psi(x) = (\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + \beta m)\psi(x) = i \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} \quad (\text{II-48})$$

$$\text{telle que } E^2 = P^2 + m^2$$

Où  $\hat{H}$  est l'opérateur Hamiltonien,  $\psi(x)$  et  $m$  sont respectivement la fonction d'onde et la masse de la particule relativiste,  $\hat{\vec{p}}$  est l'opérateur impulsion et  $\vec{\alpha}$  et  $\beta$  sont des coefficients à déterminer.

Or comme  $\hat{\vec{p}} \equiv -i\vec{\nabla}$ , l'équation de Dirac s'écrit explicitement comme:

$$(-i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m)\psi = i \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{II-49})$$

Les coefficients  $\alpha_i (i = 1, 2, 3)$  et  $\beta$  ne peuvent pas être des nombres. Ce sont des matrices  $n \times n$  et l'équation de Dirac peut-être considérée comme une équation matricielle dans la quelle la fonction d'onde  $\psi$  est une matrice colonne à  $n$  composantes :

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

Pour que cette équation soit considérée comme l'équation décrivant le mouvement relativiste d'une particule libre de masse  $m$ , chacune des composantes  $\psi_i$  de la matrice colonne  $\psi$  doit satisfaire à l'équation de Klein-Gordon *i.e.* :

## Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

---

$$(\partial^2 + m^2)\psi_i = 0 \Rightarrow (-\vec{\nabla}^2 + m^2)\psi_i(x) = \frac{\partial^2 \psi_i(x)}{\partial t^2} \quad (\text{II-50})$$

L'application de l'opérateur Hamiltonien  $\hat{H}$  de l'équation de Dirac donné par :

$$(-i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m) (-i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m) \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \quad (\text{II-51})$$

Soit donc explicitement :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^i \partial x^j} - im \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \frac{\partial \psi}{\partial x^i} + \beta^2 m^2 \psi = \\ -\partial^2 \psi \partial t^2 = -\nabla^2 + m^2 \psi \end{aligned} \quad (\text{II-52})$$

Cette relation impose donc, comme on peut le voir, des conditions sur les coefficients  $\alpha_i$  et  $\beta$ . de sorte que :

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = \{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij} I \quad (\text{II-53})$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = \{\alpha_i, \beta\} = 0 \quad (\text{II-54})$$

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = I \quad (\text{II-55})$$

Où  $I$  est la matrice identité.

La relation d'anti commutation  $\{\alpha_i, \beta\} = 0$ , indique clairement que les coefficients  $\alpha_i$  et  $\beta$  doivent être des matrices et non des nombres. D'autre part pour que l'opérateur Hamiltonien,  $\hat{H} = (-i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m)$ , soit un opérateur hermitien, il est nécessaire que les matrices  $\alpha_i$  et  $\beta$  soient des matrices hermitiennes *i.e.*  $\beta^+ = \beta$  et  $\alpha_i^+ = \alpha_i \forall i = 1,2,3$ .

La plus simple forme qui nous permet de construire les matrices  $\alpha_i$  et  $\beta$  est la dimension  $n = 4$ . Et avec le choix de la représentation dite de Dirac-Pauli, les matrices  $\beta$  et  $\alpha_i$  s'écrivent alors :

$$\beta = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}, \alpha_i = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}, i = 1,2,3 \quad (\text{II-56})$$

## Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

Où  $I$  et  $0$  sont respectivement les matrices unité et nulle  $2 \times 2$  et  $\sigma_i$  ( $i= 1,2,3$ ) sont les matrices de Pauli :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{II-57})$$

Le fait que les matrices  $\alpha_i$  et  $\beta$  soient d'ordre 4, conduit nécessairement, dans l'équation de Dirac, à ce que la fonction d'onde de la particule soit une matrice colonne à 4 éléments :

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (\text{II-58})$$

Cette forme est dite bispineur de Dirac.

### II.7 La forme covariante de l'équation de Dirac

en partant de :

$$(-i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m) \psi = i \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{II-59})$$

Et en introduisant sous forme covariante des matrices  $\gamma^\mu$  ( $\mu = 0,1,2,3$ ), appelé aussi matrice de Dirac.

On obtiendra

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \gamma^i = \beta \alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (i = 1,2,3) \quad (\text{II-60})$$

Qui peut se mettre sous la forme suivante :

$$\gamma^\mu = (\beta, \beta \vec{\alpha}) \quad (\mu = 1,2,3) \quad (\text{II-61})$$

Avec ces matrices on peut maintenant faire des multiplications on :

$$\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \frac{i}{4!} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II-62})$$

## Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

---

Où  $\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$  est le tenseur antisymétrique de Levi-Civita défini par :

$$\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} = \begin{cases} +1, & \text{si } \mu\nu\rho\sigma \text{ est une permutation paire de } 0123 \\ -1, & \text{si } \mu\nu\rho\sigma \text{ est une permutation impaire de } 0123 \\ 0, & \text{si au moins deux indices sont égaux} \end{cases}$$

Maintenant après avoir consulté toutes les propriétés discute aux paravents, on passera à réécrire l'équation de Dirac sous forme covariante :

$$\left[ -i \left( \beta \frac{\partial}{\partial t} + \beta \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) + \beta^2 m \right] \psi = 0 \quad (\text{II-63})$$

$$[-i(\gamma^0 \partial_0 + \gamma^k \partial_k) + m] \psi = 0 \quad (\text{II-64})$$

$$\Rightarrow (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi = 0 \quad (\text{II-65})$$

En utilisant la notation de Feynman  $\gamma^\mu \partial_\mu \equiv \not{\partial}$ , l'équation de Dirac covariante, s'écrit sous la forme compacte :

$$(i\not{\partial} - m) \psi = 0 \quad (\text{II-66})$$

Essayons maintenant de montrer que l'équation de Dirac conduit, comme l'équation de Schrödinger et de Klein-Gordon, à l'équation de continuité de densité-courant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (\text{II-67})$$

Pour cela multipliant l'équation de Dirac à gauche par  $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$  où  $\psi^\dagger$  est le complexe conjugué, transposé de  $\psi^*$ :

$$i\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi - m\bar{\psi} \psi = 0 \quad (\text{II-68})$$

D'autre part multipliant le complexe conjugué transposé  $\psi^*$  de l'équation de Dirac à droite par  $\gamma^0 \psi$  i. e. :

$$i\partial_\mu\psi^+(\gamma^\mu)^+\gamma^0\psi + m\bar{\psi}\psi = 0 \quad (\text{II-69})$$

la somme des ces deux expressions dernière donné la relation suivante :

$$i(\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi + \partial_\mu\psi^+(\gamma^\mu)^+\gamma^0\psi) = 0 \quad (\text{II-70})$$

Or comme  $\gamma^0\gamma^0 = I$  et comme  $\gamma^0(\gamma^\mu)^+\gamma^0 = \gamma^\mu$ , ça va nous donner :

$$\begin{aligned} i(\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi + \partial_\mu\psi^+\gamma^0\gamma^0(\gamma^\mu)^+\gamma^0\psi) &= i(\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi + \partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) = \\ i\partial_\mu(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) &= \\ 0 & \end{aligned} \quad (\text{II-71})$$

Introduisant le quadrivecteur courant,  $j^\mu = (\rho, \vec{j}) = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ , avec  $\rho = \bar{\psi}\gamma^0\psi = \psi^+\psi = \sum_{i=1}^4 |\psi_i|^2$  représentant la densité de probabilité et  $\vec{j} = \bar{\psi}\vec{\gamma}\psi$  est le vecteur courant. On a donc finalement l'équation suivante :

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (\text{II-72})$$

Qui n'est autre que la forme covariante de l'équation de continuité. En effet en développant cette équation, on obtient :

$$\begin{aligned} \partial_\mu j^\mu &= \frac{\partial(\bar{\psi}\gamma^0\psi)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\bar{\psi}\vec{\gamma}\psi) \\ &= \frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} \end{aligned} \quad (\text{II-73})$$

Même équation donnée par Schrödinger au chapitre I.

## II.8 La transformation de l'équation de Dirac

Essayant maintenant d'utiliser les spineurs de Dirac, ne se transforment donc pas comme des quadrivecteurs sous les transformations de Lorentz. La transformation de Lorentz est définie comme :  $x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$ , il existe une transformation correspondante  $\psi'(x') = S\psi(x)$  où S est un opérateur de

## Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

transformation linéaire, laissant l'équation de Dirac invariante. Le principe d'équivalence des référentiels garanti l'existence d'un opérateur de transformation inverse, permettant de passer de  $\psi'(x')$  à  $\psi(x)$  *i.e.*  $\psi(x) = S^{-1}\psi'(x')$ , avec  $S^{-1}S = I$

Pour l'équation de Dirac exprimée dans un référentiel  $\mathcal{R}$ :

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi(x) = 0 \quad (\text{II-74})$$

Soit covariante, il faut que sa forme reste inchangée lorsqu'on passe dans un autre référentiel  $\mathcal{R}'$  *i.e.* que dans ce référentiel elle s'écrit :

$$(i\gamma^\nu \partial'_\nu - m)\psi'(x') = 0 \quad (\text{II-75})$$

Où:

$$\partial'_\nu \equiv \frac{\partial}{\partial x'^\mu} = \Lambda_\nu^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Lambda_\nu^\mu \partial_\mu \quad (\text{II-76})$$

Et  $\psi'(x') = S\psi(x)$

En utilisant maintenant la transformation de Lorentz inverse de  $\psi(x)$  *i.e.*  $S^{-1}\psi'(x')$ , l'équation de Dirac dans le référentiel  $\mathcal{R}$  prend la forme:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)S^{-1}\psi'(x') = 0 \quad (\text{II-77})$$

Si on multiplie cette équation à gauche par S. on obtient alors :

$$(iS\gamma^\mu S^{-1}\partial_\mu - m)\psi'(x') = 0 \quad (\text{II-78})$$

Qui peut s'écrire, en utilisant la transformée de Lorentz inverse de  $\partial_\mu$  *i.e.*  $\Lambda_\mu^\nu \partial'_\nu$ , comme :

$$(iS\gamma^\mu S^{-1}\Lambda_\mu^\nu \partial'_\nu - m)\psi'(x') = 0 \quad (\text{II-79})$$

Pour que cette équation soit covariante sous les transformations de Lorentz, il faut que :

## Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

---

$$S\gamma^\mu S^{-1}\Lambda_\mu^\nu = \gamma^\nu \quad (\text{II-80})$$

Soit vérifie :

$$S\gamma^\mu S^{-1} = \Lambda_\mu^\nu \gamma^\nu \quad (\text{II-81})$$

En effet si on multiplie à droite  $S\gamma^\mu S^{-1}\Lambda_\mu^\nu = \gamma^\nu$  par  $g_{\nu\sigma}g^{\mu\rho}\gamma^\sigma$ , on aura :

$$S\gamma^\mu S^{-1}\Lambda_\mu^\nu g_{\nu\sigma}g^{\mu\rho}\gamma^\sigma = \gamma^\nu g_{\nu\sigma}g^{\mu\rho}\gamma^\sigma = \gamma^\nu \gamma_\nu g^{\mu\rho} \quad (\text{II-82})$$

$$\Rightarrow S\gamma^\mu S^{-1}\Lambda_\sigma^\rho \gamma^\sigma = 4I g^{\mu\rho} \quad (\text{II-83})$$

En multipliant à gauche par  $S\gamma_\mu S^{-1}$ , on obtient :

$$4I\Lambda_\sigma^\rho \gamma^\sigma = 4IS\gamma_\mu S^{-1}g^{\mu\rho} = 4IS\gamma^\rho S^{-1} \quad (\text{II-84})$$

Soit donc :

$$S\gamma^\rho S^{-1} = \Lambda_\sigma^\rho \gamma^\sigma \quad (\text{II-85})$$

Qu'on peut la réécrire en changeant les indices :

$$S\gamma^\mu S^{-1} = \Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu \quad (\text{II-86})$$

Explicitant les transformations de Lorentz particulières, où on sait qu'il y a l'opération parité. La transformation de Lorentz  $\Lambda^\mu_\nu$  de cette opération discrète qui consiste à inverser les coordonnées d'espace est donnée par :

$$\Lambda^\mu_\nu \equiv P^\mu_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = g^{\mu\nu} \quad (\text{II-87})$$

## Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

La matrice  $S$ , qu'on notera  $S_P$ , correspondant à cette transformation, satisfaisant dans ce cas, aux relations :

$$S_P^{-1} \gamma^\mu S_P = \begin{cases} \gamma^0 & \text{pour } \mu = 0 \\ -\gamma^k & \text{pour } \mu = k = 1, 2, 3 \end{cases} \quad (\text{II-88})$$

### II.9 L'étude de particules libres

Cherchons maintenant comment trouver les solutions de Dirac pour une particule libre sous la forme d'une onde plane :

$$\psi(x) = u(p)e^{-ip \cdot x} \equiv \psi(\vec{x}, t) = u(E, \vec{p})e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})} \quad (\text{II-89})$$

Où  $x$  et  $p$  sont respectivement les quadrivecteurs position et impulsion.  $u(p)$  est un spineur de Dirac (vecteur colonne à quatre composantes) indépendant de  $x$ .

Remplaçant  $\psi(x)$  par son expression onde plane l'équation de Dirac on obtient :

$$(\not{p} - m)u(p) = 0 \quad \text{avec} \quad \not{p} = \gamma^\mu p_\mu \quad (\text{II-90})$$

Cette équation s'appelle aussi équation de Dirac dans l'espace des impulsions.

Développant cette équation, d'une manière plus clair on aura :

$$\begin{pmatrix} (E - m)I & -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -(E + m)I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (E - m)u_A - (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})u_B \\ (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})u_A - (E + m)u_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II-91})$$

Où  $I$  est la matrice unité  $2 \times 2$ . Les termes  $u_A$  et  $u_B$  sont deux matrices colonnes à deux éléments correspondant respectivement aux deux composantes supérieurs et inférieur du spineur de Dirac  $u$ .

Où

$$u_A = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E - m} u_B = \frac{1}{E - m} \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} u_B \quad (\text{II-92})$$

## Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

---

Et

$$u_B = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E+m} u_A = \frac{1}{E+m} \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} u_A \quad (\text{II-93})$$

On injectant l'expression de  $u_B$  en fonction de  $u_A$  dans la première équation on obtient:

$$E^2 - m^2 = (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 = \vec{p}^2 \quad (\text{II-94})$$

Cette relation, correspond à la relation usuelle d'énergie-impulsion relativiste, montre que l'équation de Dirac admet, comme pour l'équation de Klein-Gordon, à deux solutions:

$$E = \pm \sqrt{m^2 + \vec{p}^2} \quad (\text{II-95})$$

Une solution d'énergie positive et une solution d'énergie négative.

En partant de la relation exprimant  $u_B$  en fonction de  $u_A$  obtenue plus haut et en choisissant deux solutions ondes planes indépendantes, *i.e.* et en posant :

$$u_{A,1} = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad u_{A,2} = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II-96})$$

Où  $N$  est un facteur de normalisation, on en déduit respectivement les relations suivantes:

$$u_1 = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z}{E+m} \\ \frac{p_x + ip_y}{E+m} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad u_2 = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{p_x - ip_y}{E+m} \\ \frac{-p_z}{E+m} \end{pmatrix} \quad (\text{II-97})$$

## Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

---

Avec  $E$  correspondant à la solution d'énergie positive,  $E = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$  car autrement les spineurs  $u_1$  et  $u_2$  contiendraient des composantes infinies si on se place dans le système de repos de la particule.

De même en partant de la relation exprimant  $u_A$  en fonction de  $u_B$  et en posant :

$$u_{B,1} = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad u_{B,2} = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II-98})$$

On obtient respectivement les relations :

$$u_3 = N \begin{pmatrix} \frac{p_z}{E-m} \\ \frac{p_x+ip_y}{E-m} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad u_4 = N \begin{pmatrix} \frac{p_x-ip_y}{E-m} \\ -\frac{p_z}{E-m} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II-99})$$

Avec  $E$  correspondant à la solution d'énergie,  $E = -\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$  pour la même raison invoquée plus haut.

Finalement on peut dire que pour une particule de masse  $m$  et d'impulsion  $\vec{p}$ , quatre solutions indépendantes, existe deux avec une énergie positive  $E = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$  et deux avec une énergie négative  $E = -\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$ .

Le facteur de normalisation  $N$  est obtenu à partir de la normalisation des spineurs de Dirac  $u_i (i = 1,2,3,4)$  qui est donnée par :

$$u_1^\dagger u_1 = u_2^\dagger u_2 = u_3^\dagger u_3 = u_4^\dagger u_4 = 2|E| \quad (\text{II-100})$$

Ce qui nous amène à:

$$N = \sqrt{E + m} \quad (E > 0) \quad \text{pour } u_1 \text{ et } u_2 \quad (\text{II-101})$$

$$N = \sqrt{-E + m} \quad (E < 0) \quad \text{pour } u_3 \text{ et } u_4 \quad (\text{II-102})$$

## Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

---

Les quatres spineurs de Dirac, solutions de l'équation de Dirac dans l'espace des impulsions, s'écrivent donc :

$$u_1 = \sqrt{E+m} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z}{E+m} \\ \frac{p_x+ip_y}{E+m} \end{pmatrix}, \quad u_2 = \sqrt{E+m} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{p_x-ip_y}{E+m} \\ \frac{-p_z}{E+m} \end{pmatrix} \quad (\text{II-103})$$

$$u_3 = \sqrt{-E+m} \begin{pmatrix} \frac{p_z}{E-m} \\ \frac{p_x+ip_y}{E-m} \\ \frac{1}{0} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_4 = \sqrt{-E+m} \begin{pmatrix} \frac{p_x-ip_y}{E-m} \\ \frac{-p_z}{E-m} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II-104})$$

Pour une particule se propageant le long de l'axe  $z$  *i.e.*  $\vec{p} = (0,0,p)$ , les 4 spineurs de Dirac que nous venons d'obtenir s'écrivent :

$$u_1 = \sqrt{E+m} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p}{E+m} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_2 = \sqrt{E+m} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-p}{E+m} \end{pmatrix} \quad (\text{II-105})$$

$$u_3 = \sqrt{-E+m} \begin{pmatrix} \frac{p}{E-m} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_4 = \sqrt{-E+m} \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{-p}{E-m} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II-106})$$

Ces spineurs sont états propres de l'opérateur de spin  $\hat{S}_z$  défini par :

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} \Sigma_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{II-107})$$

Avec comme valeurs propres sont  $\pm \frac{1}{2}$  :

$$\hat{S}_z u_1 = +\frac{1}{2} u_1, \quad \hat{S}_z u_3 = +\frac{1}{2} u_3$$

$$\hat{S}_z u_2 = -\frac{1}{2} u_2, \quad \hat{S}_z u_4 = -\frac{1}{2} u_4$$

On en déduit donc que  $u_1$  et  $u_2$  représentent les deux états de spin d'une particule d'énergie  $E = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$  et  $u_3$  et  $u_4$  représentent les deux états de spin d'une particule d'énergie  $E = -\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$ .

### II.10 L'interprétation de la solution d'énergie négative

Les spineurs de Dirac  $u_3$  et  $u_4$  correspondant aux deux états de spin d'une particule d'impulsion  $\vec{p}$  et d'énergie négative  $E = -\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$ .

Feynman proposèrent dans les années 40 de réinterpréter ces deux états comme représentant les deux états de spin d'une antiparticule d'énergie positive  $E = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$  et d'impulsion  $\vec{p}$  correspondant à une particule d'énergie négative  $E = -\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$  remontant le temps *i.e.* d'impulsion  $-\vec{p}$ . En d'autres termes il faut réexprimer les deux solutions  $u_3$  et  $u_4$  de l'équation de Dirac à partir de la fonction d'onde  $\psi(x)$  de départ en inversant les signes de  $E$  et  $\vec{p}$  *i.e.* :

$$\psi(x) = u(-p)e^{ip \cdot x} \equiv u(-E, -\vec{p})e^{(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})} \quad (\text{II-108})$$

Les solutions obtenues dans ce cas appelées dorénavant  $v_1$  et  $v_2$ , elles ont pour expressions :

$$v_1(E, \vec{p}) \equiv u_4(-E, -\vec{p}) = \sqrt{E + m} \begin{pmatrix} \frac{p_x - ip_y}{E + m} \\ \frac{-p_z}{E + m} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II-109})$$

Et

$$v_2(E, \vec{p}) \equiv u_3(-E, -\vec{p}) = \sqrt{E + m} \begin{pmatrix} \frac{p_z}{E + m} \\ \frac{p_x + ip_y}{E + m} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II-110})$$

Avec cette fois ci  $E = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$ .

Le fait de relier  $v_1$  à  $u_4$  et  $v_2$  à  $u_3$  est motivé par les considérations suivantes :

Nous avons vu que pour une particule se propageant le long de l'axe  $z$  le spineur de Dirac  $u_4$  est un état propre de spin avec  $S_z = -\frac{1}{2}i.e.$  dirigé le long  $-z$ . Or sous la transformation  $(E, \vec{p}) \rightarrow (-E, -\vec{p})$  le moment angulaire orbital  $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$  change de signe et la conservation du moment angulaire total

$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  ne peut être préservée (*i.e.*  $[H, \vec{J}] = 0$ ) que si on fait la transformation  $\vec{S} \rightarrow -\vec{S}$ . appliquée à  $u_4$  cette transformation conduit au spineur de Dirac  $v_1$  qui représente une antiparticule avec un spin dirigé suivant  $+z$ . ainsi le spin de l'antiparticule associée au spineur de Dirac  $v_1$  et le même que le spin de la particule associé au spineur de Dirac  $u_1$  *i.e.*  $S_z = +\frac{1}{2}$ . De même les spineurs  $v_2$  (antiparticule) et  $u_2$  (particule) correspondent à deux états propres de spin avec  $S_z = -\frac{1}{2}$ .

En grosso modo on peut dire que, les spineurs de Dirac  $u_1$  et  $u_2$  correspondent aux deux états de spin d'une particule de spin  $\frac{1}{2}$ , d'énergie  $E = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$  et d'impulsion  $\vec{p}$  (*e.g.* l'électron) et les spineurs de Dirac  $v_1$  et  $v_2$  correspondent aux états de spin antiparticule de spin  $\frac{1}{2}$ , d'énergie  $E = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$  et d'impulsion  $\vec{p}$  (*e.g.* le positron).

Leurs expressions sont :

$$u_1 = \sqrt{E + m} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z}{E+m} \\ \frac{p_x + ip_y}{E+m} \end{pmatrix}, \quad u_2 = \sqrt{E + m} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{p_x - ip_y}{E+m} \\ \frac{-p_z}{E+m} \end{pmatrix} \quad (\text{II-111})$$

$$u_1 = \sqrt{E + m} \begin{pmatrix} \frac{p_x - ip_y}{E+m} \\ \frac{-p_z}{E+m} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad v_1 = \sqrt{E + m} \begin{pmatrix} \frac{p_z}{E+m} \\ \frac{p_x + ip_y}{E+m} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II-112})$$

Où  $u_1$  et  $u_2$  vérifié bien l'équation de Dirac :

$$(\not{p} - m)u_s = 0 \quad (\text{II-113})$$

$$p = (E, \vec{p}) \rightarrow -p = (-E, -\vec{p}),$$

L'équation de Dirac s'écrit maintenant:

$$(\not{p} + m)v_s = 0 \quad (\text{II-114})$$

D'autre part les spineurs adjoints  $\bar{u}_s$  et  $\bar{v}_s$  satisfaisant les équations suivantes :

$$\bar{u}_s(\not{p} - m) = 0 \text{ et } \bar{v}_s(\not{p} + m) = 0 \quad (\text{II-115})$$

## II.11 Conclusion

Ce que nous déduisons de ce chapitre est que Dirac a imaginé une nouvelle interprétation au vide en disant qu'il correspond à une situation où tous les niveaux d'énergie négative sont occupés par les électrons. Si on lui 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. Si maintenant on retire un électron d'énergie négative, le trou ainsi créé apparait 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

## **Chapitre II      Equation de Dirac et phénomène de l'antimatière.**

---

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 une 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. Cette imagination a bouleversée toute la physique et c'est qu'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 d'où phénomène de l'antimatière [1-12].

Après avoir arrivé à ce stade, nous allons convertir tous ce que nous avons fait théoriquement à des équations numériques accessibles aux calculs ce qui constitue la partie la plus laborieuse de notre travail et ça sera le travail du dernier chapitre.

## Références

- [1] P. A. M. Dirac, Proc. R. Soc. London, Ser. A **123**, 714 \_1929\_.
- [2]R. P. Feynman, Mathematical Formulation of the Quantum Theory of Electromagnetic Interaction, Phys. Rev. 80, 440 (1950)
- [3]R. P. Feynman, Quantum electrodynamics, Benjamin, New York (1962)
- [4]R. P. Feynman and A. R. Hibbs, Quantum mechanics and path integrals, McGraw-Hill, New York (1965)
- [5]C. Itzykson and J.B. Zuber, Quantum \_eld theory, McGraw-Hill, New York (1980)
- [6] L. Landau, E. Lifchitz, Cours de Physique Theorique, Tome 3, M\_ecanique Quantique (Editions Mir, Moscou, 1966).
- [7] M. Brack, Rajat K. Bhaduri, Semi-classical Physics (Addison-Wesley, 1997).
- [8] L. I. Schi\_, Quantum Mechanics (Mc Graw-Hill, 1968).
- [9]Revista Mexicana de Física 42, No. 1 (1996) 1-11  
On the relativistic hydrogen atom VÍCTOR M. VILLALBA'  
Centro de Física, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas IVIC
- [10]Le mariage de la relativité et de la mécanique quantique et la naissance de l'antimatière Notes de Pascal Debu 25ème festival d'astronomie de Fleurance, 7-14 août 2015
- [11] Polycopie en cours préparation 'Theorie quantique et renormalisation' S. Koudri.
- [12] The Quantum Theory of the Hydrogen Atom Felix Nendzig January 31, 2014.



# *CHAPITRE III*

*Résolution numérique de  
l'équation de Dirac*

### III.1 introduction

Afin de déterminer les niveaux d'énergie d'une particule dans un potentiel Coulombien  $V(r)$ , nous avons résolu l'équation de Dirac dont l'idée est de travailler avec une équation du 1<sup>er</sup> ordre dont le carré redonne l'équation de Klein-Gordon. Cette équation qui a bouleversé toute la physique que se soit physique quantique ou physique générale a trouvé son explication que par l'apport des matrices de Pauli. Ces matrices qui donnent une grande signification physique à la grandeur moment cinétique de spin déjà découverte par l'expérience de Stern et Gerlach appartiennent à un groupe nommé SU(2). D'ailleurs ce fameux groupe contient des matrices unitaires spéciales. Alors en se rattachant au problème mathématique lié aux dérivés par rapport à l'espace et le temps on peut facilement déterminer les solutions exactes de cette équation importante. Nous en donnerons ici comment marche le processus.

### III.2 Méthode de calcul

Alors en partant de l'équation suivante :

$$(c\sigma_x p_x + mc^2\beta)\varphi = (E - V(x))\varphi \quad (\text{III-1})$$

Où on remplace les matrices  $\sigma_x$  et  $\beta$  par leurs expressions, on obtient alors :

$$\left[ c \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} p_x + mc^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix} = (E - V(x)) \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix} \quad (\text{III-2})$$

$$c \begin{pmatrix} 0 & \varphi_B \\ \varphi_A & 0 \end{pmatrix} p_x + mc^2 \begin{pmatrix} \varphi_A & 0 \\ 0 & -\varphi_B \end{pmatrix} = (E - V(x)) \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix} \quad (\text{III-3})$$

$$\begin{pmatrix} 0 & c\varphi_B p_x \\ c\varphi_A p_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2\varphi_A & 0 \\ 0 & -mc^2\varphi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (E-V(x))\varphi_A \\ (E-V(x))\varphi_B \end{pmatrix} \quad (\text{III-4})$$

Les deux équations ainsi obtenus s'écrivent comme :

$$\begin{cases} c\varphi_B p_x + mc^2\varphi_A = (E - V(x))\varphi_A \\ c\varphi_A p_x - mc^2\varphi_B = (E - V(x))\varphi_B \end{cases} \quad (\text{III-5})$$

$$(2) \Rightarrow c\varphi_A p_x = E\varphi_B - V(x)\varphi_B + mc^2\varphi_B \quad (\text{III-6})$$

$$c\varphi_A p_x = (E - V(x) + mc^2)\varphi_B \quad (\text{III-7})$$

La composante  $\varphi_B$  est :

$$\varphi_B = \frac{c\varphi_A p_x}{E - V(x) + mc^2} \quad (\text{III-8})$$

Avec

$$E = \varepsilon + mc^2 \quad (\text{III-9})$$

Finalement on obtiendra la fameuse expression :

$$\varphi_B = \left( \frac{c p_x}{\varepsilon + 2mc^2 - V(x)} \right) \varphi_A \quad (\text{III-10})$$

Or  $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

En insérant l'expression de  $\varphi_B$  du(2) dans(1), ce qui conduit :

$$c\varphi_B p_x + mc^2\varphi_A = (E - V(x))\varphi_A \quad (\text{III-11})$$

$$c\varphi_B p_x = (E - V(x) - mc^2)\varphi_A \quad (\text{III-12})$$

$$-c^2(\varepsilon + 2mc^2 - V(x))^{-1} \frac{d^2\varphi_A}{dx^2} - mc^2 \frac{d\varphi_A}{dx} \left( \frac{d(\varepsilon + 2mc^2 - V(x))^{-1}}{dx} \right) = (\varepsilon - V(x))\varphi_A \quad (\text{III-13})$$

Après avoir obtenus cette fameuse équation nous allons procéder les étapes de

résolution toute en négligeant le terme  $\left( \frac{d(\varepsilon + 2mc^2 - V(x))^{-1}}{dx} \right)$  juste au point où

$$\frac{d\varphi_A}{dx} = 1 \text{ et } \varphi_A(0) = 0 \tag{III-14}$$

Comme première étape, ce qui nous simplifie notre démarche :

$$-c^2(\varepsilon + 2mc^2 - V(x))^{-1} \frac{d^2\varphi_A}{dx^2} = (\varepsilon - V(x))\varphi_A \tag{III-15}$$

$$\frac{d^2\varphi_A}{dx^2} = -\frac{1}{c^2}(\varepsilon + 2mc^2 - V(x))(\varepsilon - V(x))\varphi_A \tag{III-16}$$

La résolution numérique de cette équation repose sur le développement en série de Taylor des composantes :

$$(1) \quad \varphi_A(x + h) = \varphi_A(x) + h \frac{d\varphi_A}{dx} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\varphi_A}{dx^2} + \dots \dots \dots \tag{III-17}$$

$$(2) \quad \varphi_A(x - h) = \varphi_A(x) - h \frac{d\varphi_A}{dx} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\varphi_A}{dx^2} + \dots \dots \dots \tag{III-18}$$

En sommant les deux expressions on obtient :

$$\varphi_A(x + h) + \varphi_A(x - h) = 2\varphi_A(x) + h^2 \frac{d^2\varphi_A}{dx^2} \tag{III-19}$$

$$\frac{d^2\varphi_A}{dx^2} = \frac{\varphi_A(x+h) + \varphi_A(x-h) - 2\varphi_A(x)}{h^2} \tag{III-20}$$

Alors

$$\frac{d^2 \varphi_A(i)}{dx^2} = \frac{\varphi_A(i+1) - 2\varphi_A(i) + \varphi_A(i-1)}{h^2} \quad (\text{III-21})$$

Cette équation peut être réécrite de façon à faire apparaître une relation de récurrence entre les valeurs de  $\varphi$  aux nœuds du maillage. Le pas de la discrétisation est fixé à  $h$  et l'origine est définie par le point  $O$ .

Lors de la résolution numérique, l'algorithme débute à  $x = -2h$ . La connaissance des deux premières valeurs de  $\varphi_A(i)$  (il s'agit de l'onde plane écrite précédemment) permet d'initier la récurrence qui donne accès à tous les  $\varphi_A(i)$ .

$$\frac{\varphi_A(i+1) - 2\varphi_A(i) + \varphi_A(i-1)}{h^2} = -\frac{1}{c^2} (\varepsilon + 2mc^2 - V(x)) (\varepsilon - V(x)) \varphi_A \quad (\text{III-22})$$

### III.3 Résolution numérique

Résoudre ces équations numériquement revient à construire un organigramme de calcul inspirés par un programme écrit en fortran 77 qui repose sur la méthode des différences finis. Nous utilisons alors, notre algorithme basé :

D'ailleurs, il semble pertinent d'appliquer la méthode de discrétisation de l'espace et des opérateurs. Sous les hypothèses que  $\varphi(x)$  est au moins de classe  $C^2$ , un développement de Taylor nous permet d'écrire les deux égalités suivantes [1]:

### III.4 Résolution de l'équation de Dirac pour une particule libre

Essayant de commencer par un cas libre ou le potentiel est pratiquement nul. L'équation (III-1) deviendrait :

$$(c\sigma_x p_x + mc^2 \beta) \varphi = (E - 0) \varphi \quad (\text{III-23})$$

Et après un simple calcul basé sur la discrétisation de la fonction d'onde *via* ces dérivées secondes on obtient :

$$\frac{\varphi_A(i+1) - 2\varphi_A(i) + \varphi_A(i-1)}{h^2} = -\frac{1}{c^2}(\varepsilon + 2mc^2 - 0)(\varepsilon - 0)\varphi_A(i)$$

Remplaçant i+1 par i car i est un indice muet ceci donne :

$$\begin{aligned} \frac{\varphi_A(i) - 2\varphi_A(i-1) + \varphi_A(i-2)}{h^2} \\ = -\frac{1}{c^2}(\varepsilon + 2mc^2 - 0)(\varepsilon - 0)\varphi_A(i-1) \end{aligned}$$

$$\varphi_A(i) = 2\varphi_A(i-1) - \varphi_A(i-2) - \frac{1}{c^2}(\varepsilon + 2mc^2)h^2(\varepsilon)\varphi_A(i-1) \quad \text{(III-24)}$$

En appliquant notre organigramme on obtient des figures relatives à la variation de la fonction d'onde *via* la distance et l'énergie. Notons ici que nous avons pris comme condition initiales  $\varphi_A(0) = 10$ . d0:

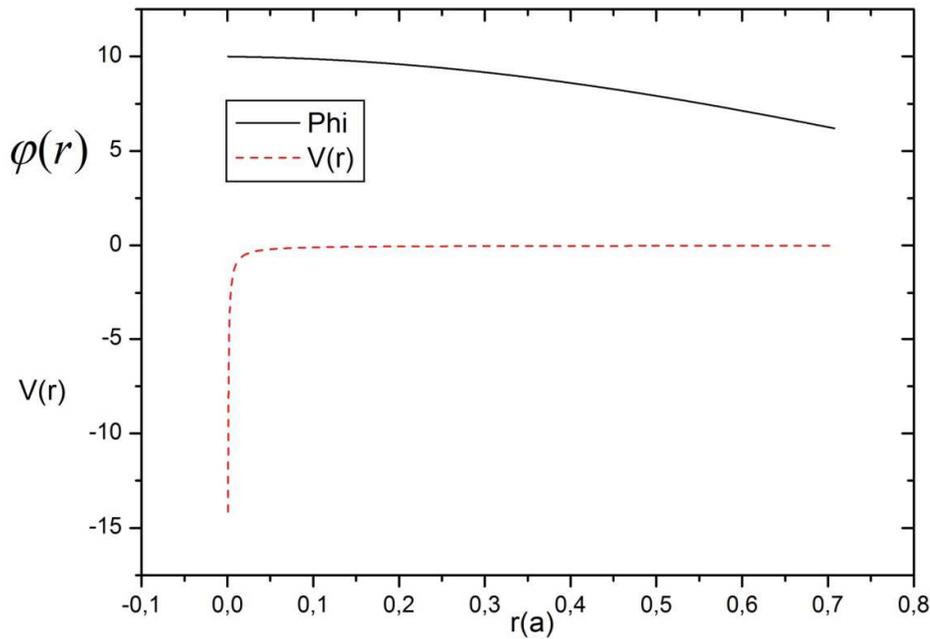
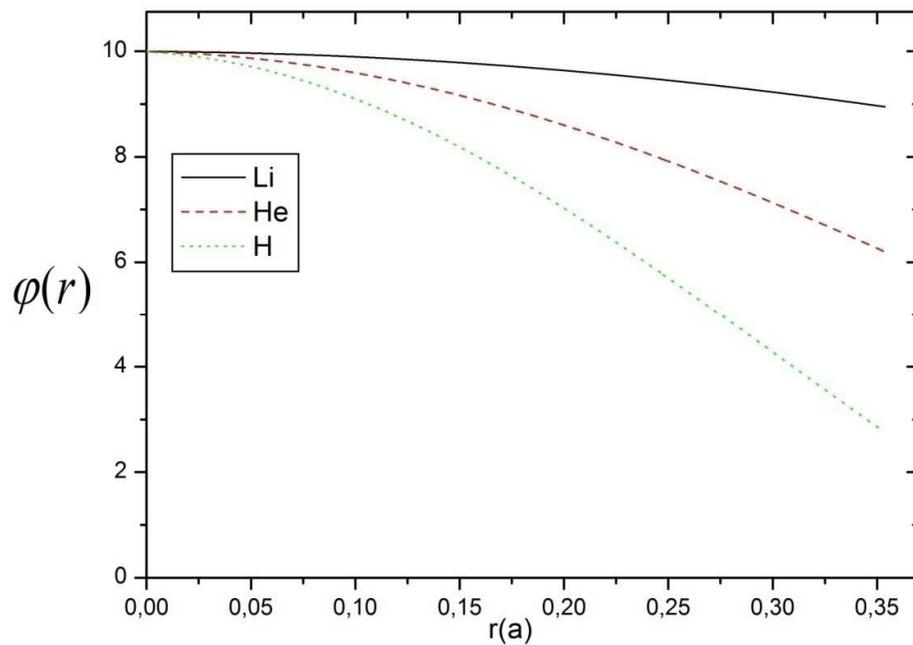


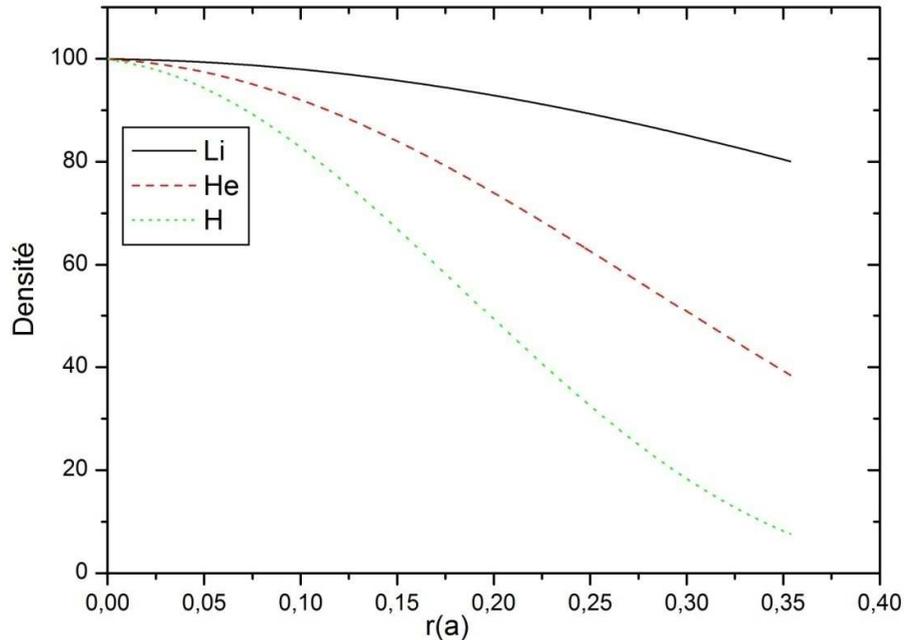
Figure III-1 : Présentation du potentiel Coulombien de l'atome d'hélium.

La figure (III-1) montre l'évolution du potentiel Coulombien et la fonction d'onde de la particule. Nous pouvons dire que notre fonction prenne sa valeur maximale quand le potentiel n'a aucun effet sur la particule comme la montre la figure. Sa comportement tend vers zéro au fur a mesure ou le potentiel prend certaine valeurs bien spécifique.



**Figure III-2a : Evolution de la fonction d'onde déduite des particules qui proviennent des différentes espèces d'atomes : hydrogène, helium et lithium.**

**a : est le rayon de Bohr.**



**Figure III-2b : Evolution de la densité pour les différentes espèces d'atomes : hydrogène, helium et lithium.**

Les figures (III-2a) et (III-2b) justifient bien ce que nous avons dit auparavant (Figure (III-1)) mais ci nous avons fait des calculs pour trois différents espèces l'hydrogène, l'hélium et le lithium. Ce que nous pouvons tirer de ces figures est que fur à mesure qu'on s'éloigne de l'élément le plus léger l'hydrogène la fonction d'onde diminue dans son amplitude d'où sa densité suit le même comportement ceci est dû au fait qu'on a négligé l'effet de la dérivée de l'inverse de la fonction généralisée  $\left(\frac{d(\varepsilon+2mc^2-V(x))^{-1}}{dx}\right) = \left(\frac{d(g(r,z,c,e))^{-1}}{dx}\right)$  car elle présente un intérêt primordial dans l'amélioration des amplitudes.

### III.5 Interprétation des résultats pour le cas d'un potentiel Coulombien

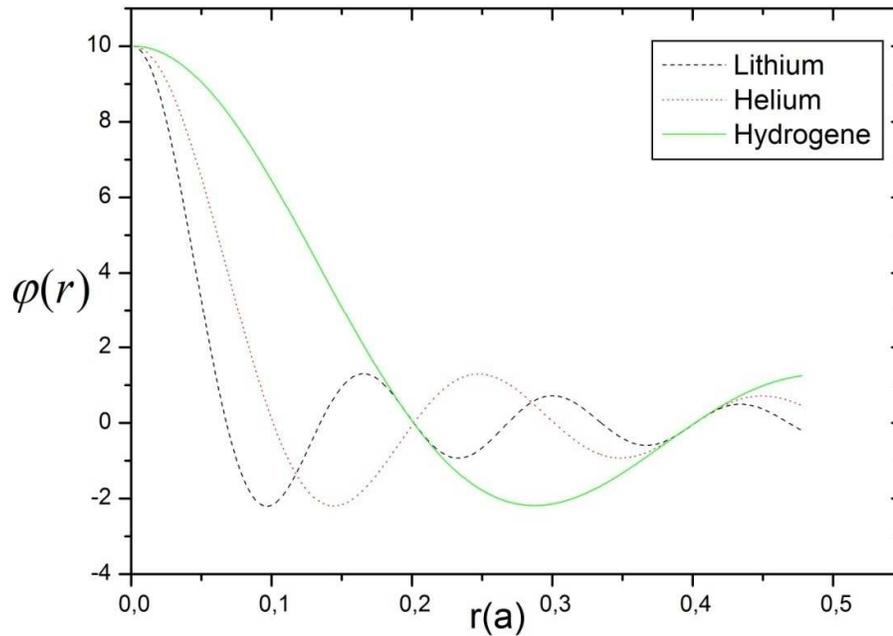
La même chose ici nous avons pris  $\varphi_A(0) = 10.0$ . La figure III-1, montre l'évolution de la fonction d'onde  $\varphi(r)$  en fonction de  $r$  pour différent type d'atomes hydrogène=H, Hélium=He et le Lithium=Li.

On remarque que la courbe en ligne continue spécifie la variation de la fonction d'onde de l'hydrogène en fonction de  $r$  présente un seul lobe relative au nombre d'électrons qu'elle contient. Pour l'Hélium, la courbe en pointillé montre que la fonction d'onde à deux lobes relatifs aux nombres d'é de l'atome

La courbe en tiret discontinue montre la variation de  $\varphi(r)$  en fonction de  $r$  pour le Lithium cette fonction présente trois lobes et au fur à mesure qu'on s'éloigné du centre du noyau de chaque atome la fonction d'onde tend à s'annuler.

Avec une méthode d'analyse reposant sur le comportement des trois fonctions  $\varphi_{hy}(r), \varphi_{he}(r), \varphi_{li}(r)$  on peut dire que ces fonctions ont un comportement de la fonction de Bessel relative à l'ordre 0.

$$J_0(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(r - \frac{1}{4}\pi\right) \quad (\text{III-25})$$

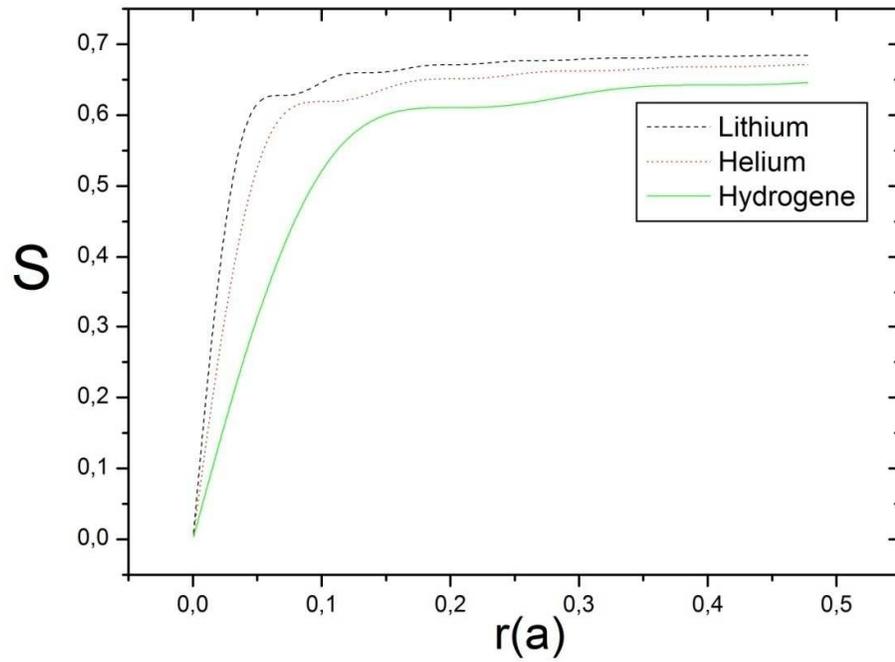


**Figure III-3 : Evolution de la fonction d'onde déduite des particules qui proviennent des différentes espèces d'atomes : hydrogène, helium et lithium.**

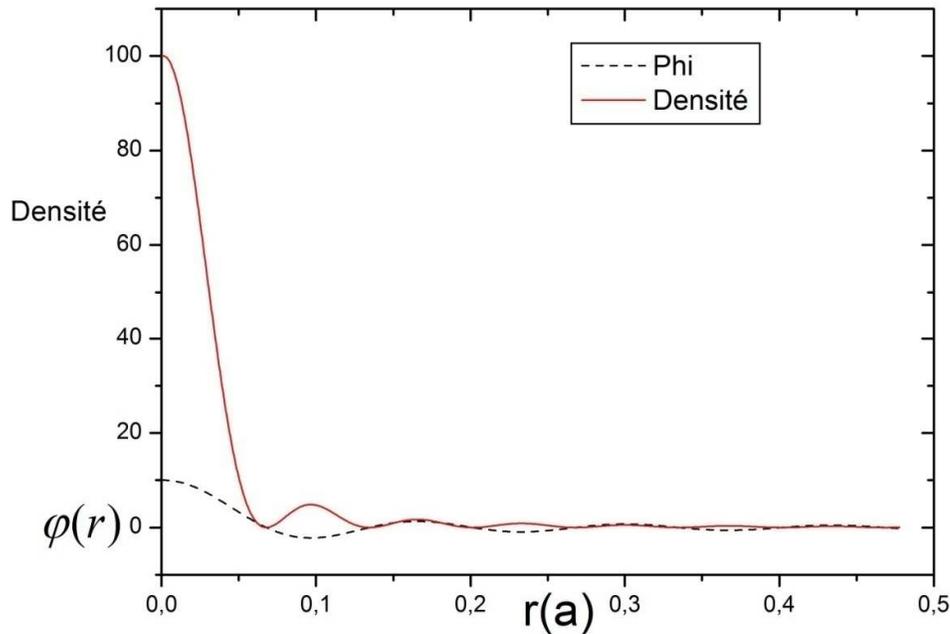
Le calcul de la densité relative à cette dernière fonction d'onde repose en premier lieu sur le calcul de sa norme en s'appuyant sur les composantes de cette fonction pour différents ordre.

$$S = \sum (\varphi(i)^2 + \varphi(i-1)^2) * \frac{h}{2} \quad (\text{III-26})$$

Où  $h$  est le pas du calcul.



**Figure III-4 : Evolution de la somme de la densité pour les différentes espèces d'atomes : hydrogène, helium et lithium.**

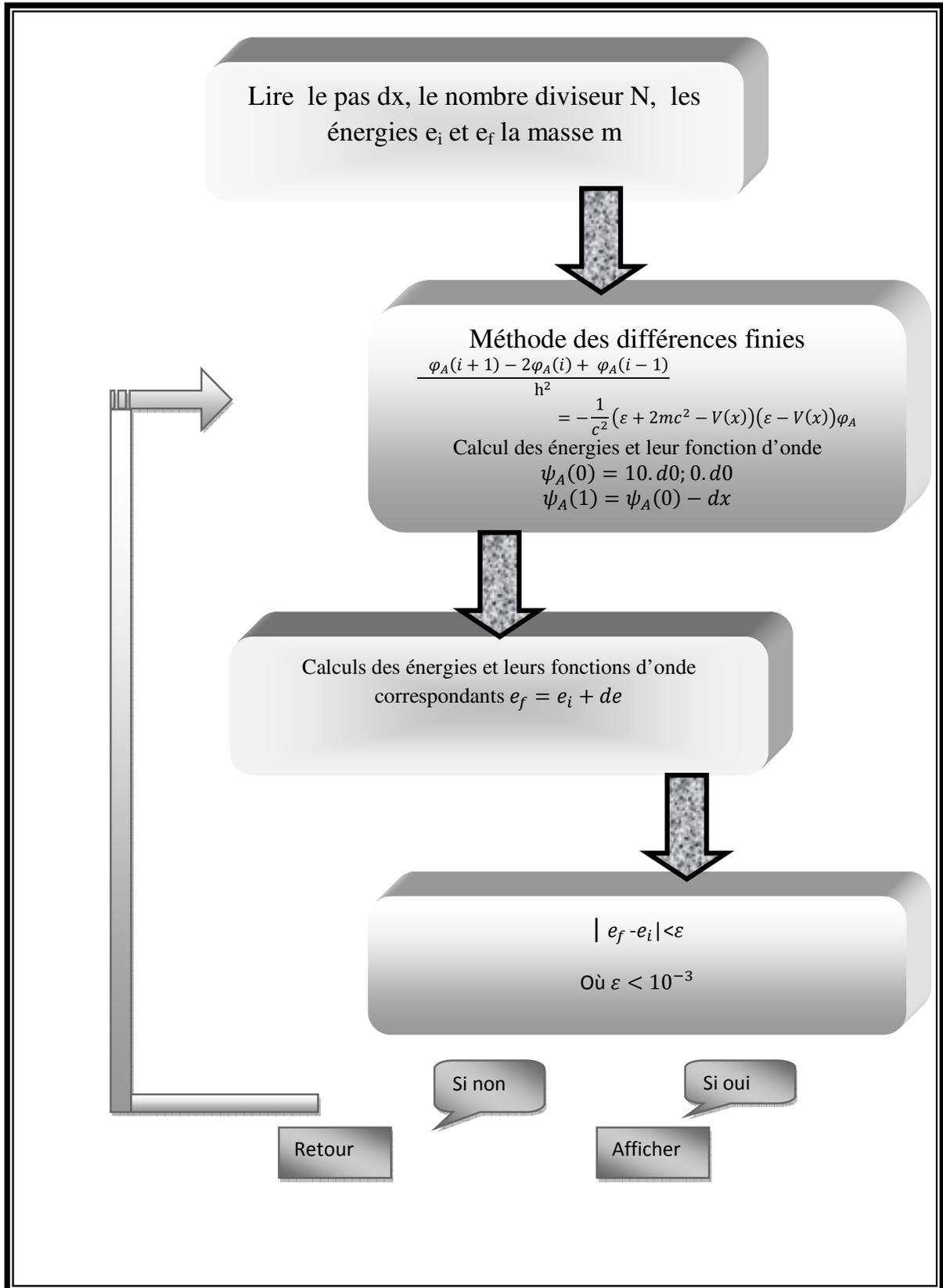


**Figure III-5 : Evolution de la norme de la densité pour les différentes espèces d'atomes : hydrogène, helium et lithium.**

Elle passe de l'origine  $r = 0$  où  $s=0$  puis elle augmente au fur à mesure qu'on augmente  $r$  puis elle sature pour chaque atome choisie : Hydrogène est moins saturé par rapport à l'He et le lithium.

He est moins saturé par rapport au li ce qui nous permet de dire que en s'éloignant de Hydrogène, le premier élément du tableau de Mendeleïev en passant par l'He, Li ,Be, B, C, N, O, F on remarque que cette somme qui n'est autre que la norme de la fonction d'onde commence à saturer élément par élément.

III.6 Organigramme de calcul



### III.7 Résolution de l'équation de Dirac d'une manière générale

Revenons à notre équation (III-13) ou en tenant compte de la dérivée première et

de la dérivée de la fonction  $\frac{d\varphi_A}{dx} \left( \frac{d(\varepsilon+2mc^2-V(x))^{-1}}{dx} \right)$ .

Alors après avoir aboutit à l'équation généralisée qui donne les dérivées seconde et première en fonction de la composante de la fonction d'onde solution de l'équation de Dirac, nous pouvons alors expliciter les dérivées secondes et premiers et calculez les différentes quantités inspirés par :

$$\frac{-c^2}{(E+2mc^2-V(x))} \frac{d^2\varphi_A}{dx^2} = mc^2 \frac{d}{dx} \left[ \frac{1}{(E+2mc^2-V(x))} \right] \frac{d\varphi_A}{dx} + (E - V(x))\varphi_A \quad \text{(III-26)}$$

Calculons alors :

$$\frac{d}{dx} \left[ \frac{1}{(E+2mc^2-V(x))} \right] = \frac{d}{dx} \left( \frac{f}{g} \right) = \frac{f'g - g'f}{g^2} \quad \text{(III-27)}$$

Avec  $f=1$ ,  $g = E+2mc^2 - V(x)$

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{f}{g} \right) = \frac{-[-V'(x)]}{(E+2mc^2-V(x))^2} \quad \text{(III-28)}$$

Or  $V(x) = -Z/x \Rightarrow V'(x) = -Z \left( \frac{-1}{x^2} \right) = Z/x^2$

Ceci donne :

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{f}{g} \right) = \frac{-Z/x^2}{(E+2mc^2-V(x))^2} \quad \text{(III-29)}$$

$$\frac{d\varphi_A(x)}{dx} = \frac{\varphi_A(i+1) - \varphi_A(i-1)}{h} \quad \text{(III-30)}$$

Ceci  $h$  : est le pas de discrétisation

$$\frac{d^2\varphi_A(x)}{dx^2} = \frac{\varphi_A(i+1) - 2\varphi_A(i) + \varphi_A(i-1)}{h^2} \quad \text{(III-31)}$$

Remplaçant alors tous ce que nous avons trouvés dans l'équation (III-26)

Nous obtenons :

$$\text{Posons : } \frac{-c^2}{E+2mc^2-V(x)} = A$$

$$E - V(x) = B \tag{III-32}$$

$$mc^2 = c \tag{III-33}$$

$$E + 2mc^2 - V(x) = D \tag{III-34}$$

$$\frac{\varphi_A(i+1)-2\varphi_A(i)+\varphi_A(i-1)}{h^2} A = C \frac{z/x^2}{D} \left[ \frac{\varphi_A(i+1)-\varphi_A(i-1)}{h} \right] + B\varphi_A(i) \tag{III-35}$$

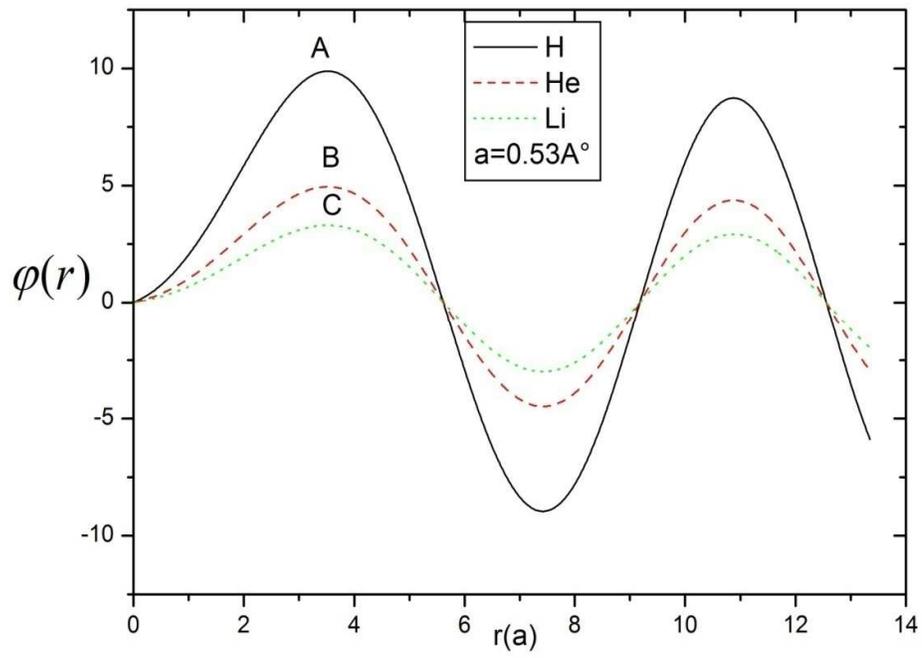
Remplaçant alors (i+1) par (i) :

$$\frac{\varphi_A(i)-2\varphi_A(i-1)+\varphi_A(i-2)}{h^2} A = C \frac{z/x^2}{D} \left[ \frac{\varphi_A(i)-\varphi_A(i-2)}{h} \right] + B\varphi_A(i-1) \tag{III-36}$$

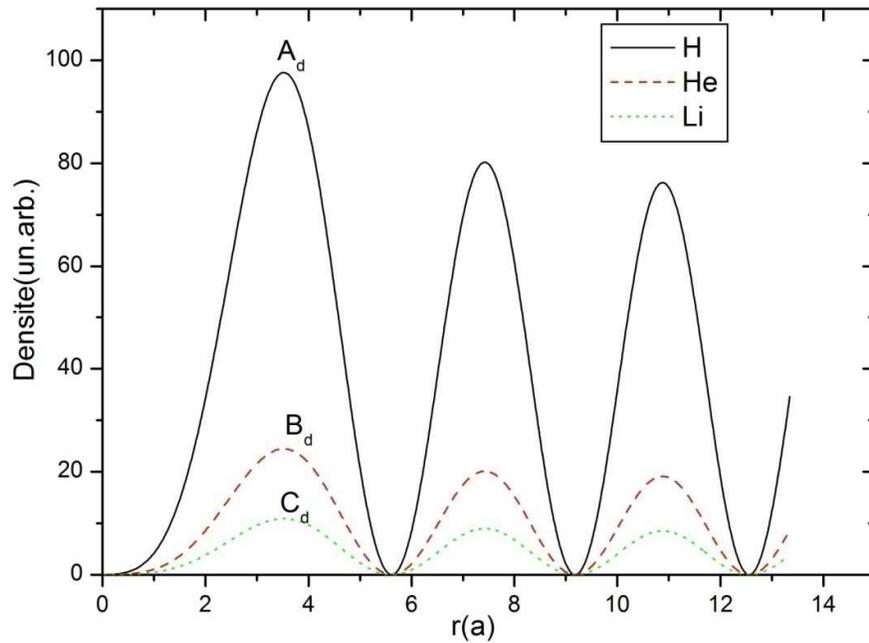
$$\frac{\varphi_A(i)}{h^2} \left[ A \cdot 1 - \frac{h^z/x^2 C}{D} \right] = \frac{2\varphi_A(i-1)}{h^2} A - \frac{\varphi_A(i-2)}{h^2} A - \frac{C}{D} \frac{z/x^2}{h} \varphi_A(i-2) \tag{III-37}$$

$$\Rightarrow \frac{\varphi_A(i)}{h^2} \left[ A - h \frac{z/x^2 C}{D} \right] = \frac{2\varphi_A(i-1)}{h^2} A - \varphi_A(i-2) \left[ \frac{A}{h^2} - \frac{C}{D} \frac{z/x^2}{h} \right] \tag{III-38}$$

Ici pour une bonne convergence nous avons pris  $\varphi_A(0) = 0$ . d0:



**Figure III-6 : Evolution de la fonction d'onde pour les différentes espèces d'atomes : hydrogène, helium et lithium.**



**Figure III-7 : Evolution de la densité pour les différentes espèces d'atomes : hydrogène, helium et lithium.**

L'analyse des figures (III-6) et (III-7) de fonction d'onde et de leurs densités qui correspond aux probabilités de présence des électrons pour les trois types d'atome l'hydrogène, l'helium et le lithium donne que leurs comportement est de type Bessel même résultats données par la référence [1]. D'ailleurs l'effet

de la dérivée de l'inverse de la fonction généralisée  $\left(\frac{d(\varepsilon+2mc^2-V(x))^{-1}}{dx}\right) =$   
 $\left(\frac{d(g(r,z,c,e))^{-1}}{dx}\right)$  est dominant pour ce cas.

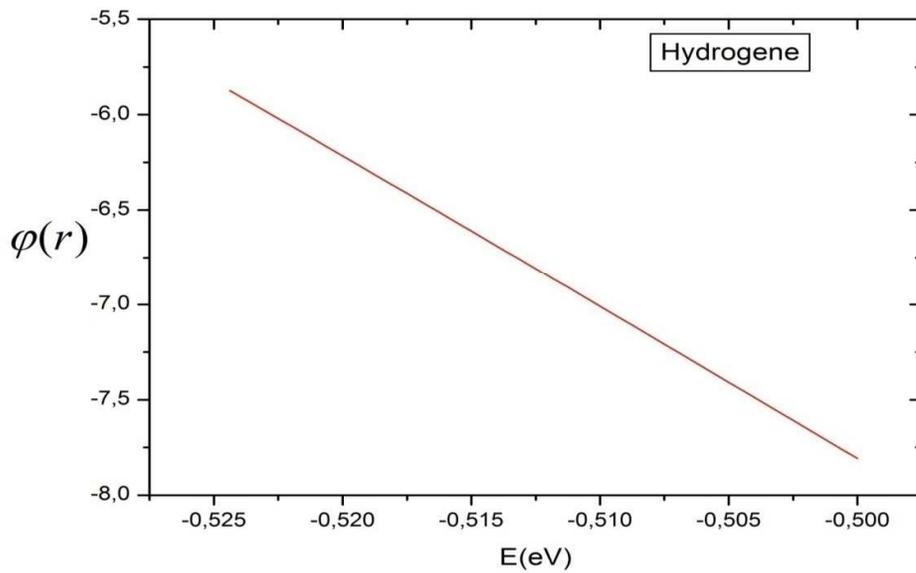


Figure III-8 : Evolution de la fonction d'onde via l'énergie

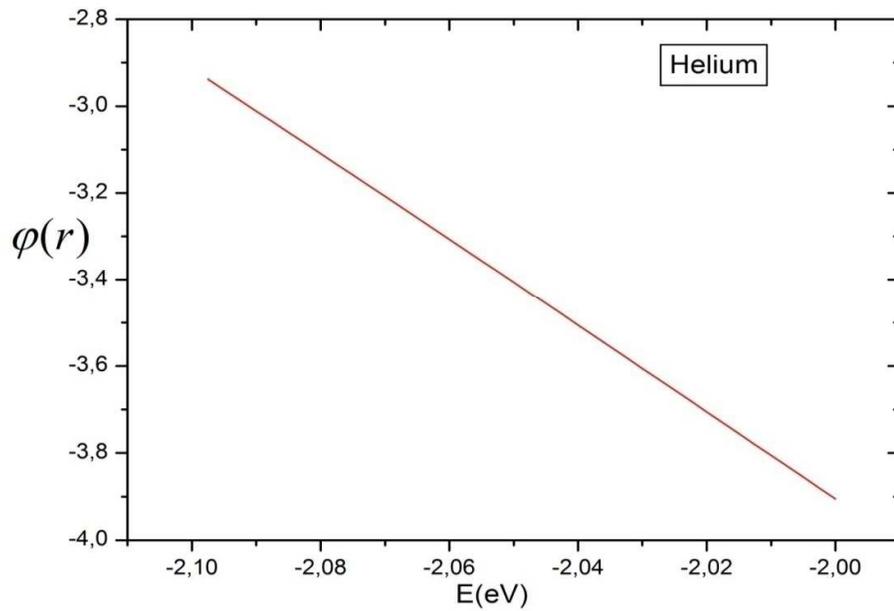
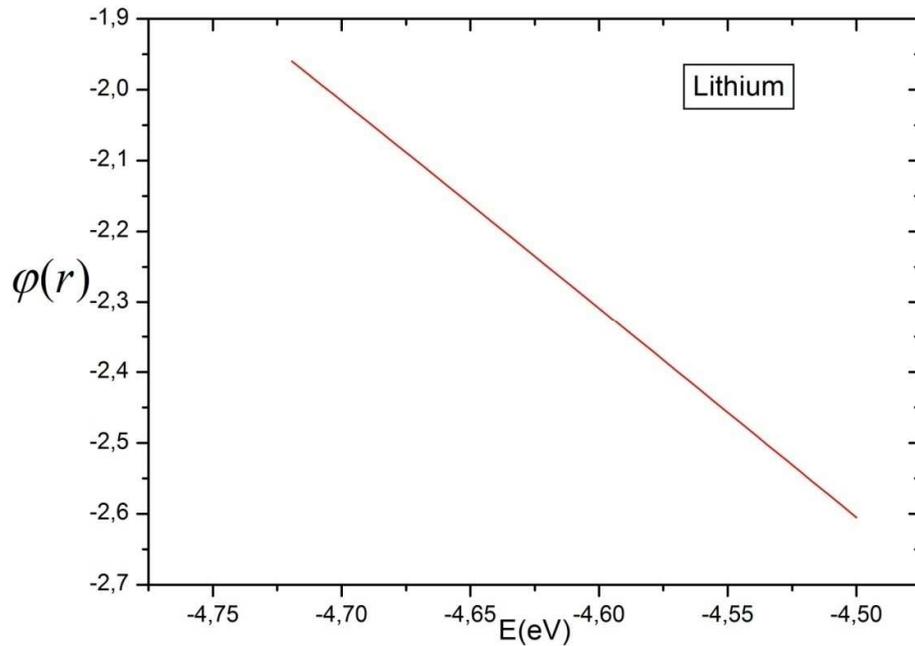


Figure III-9 : Evolution de la fonction d'onde via l'énergie



**Figure III-10 : Evolution de la fonction d'onde via l'énergie.**

Le fait que la fonction d'onde diminue au fur à mesure que l'énergie augmente via les trois figures (III-8), (III-9) et (III-10) montre bien qu'à des énergies très basse les états électroniques deviennent plus occupés d'où une densité maximale et le fait que l'énergie agrandit les états deviennent des états excités d'où des états anti liantes c'est que la probabilité tend vers zéro pour ces états.

**Tableau 1 : L'intensité des pics déduit de nos calculs de la fonction d'onde**

Pics	A	B	C	Ad	Bd	Cd
u.a.	9.92	4.93	3.30	98.40	24.30	10.89
	H	He	Li	H	He	Li

### III.8 Conclusion

Après avoir achevé notre travail, nous déduisons de cette étude que notre équation de Dirac décrit bien le phénomène de l'antimatière. L'analyse des pics déduits de nos calculs numériques montre bien qu'au fur à mesure qu'on s'éloigne de l'hydrogène la fonction d'onde diminue ce qui est le résultat des états des ions hydrogénoïdes décrit par les références [2-7]. Nous avons utilisé les unités atomiques pour pouvoir évaluer les valeurs des énergies correspondantes *via* leurs fonctions d'onde associés. Ce travail de résolution présente un axe de recherche parmi les plus grand axes en physique quantique qui traite l'équation de Dirac d'une manière dérivée première. On aurait pu aussi utilisés des matrices et décrivez les fonctions d'ondes comme des vecteurs colonne ce qui revient à déterminer l'équation aux valeurs propres  $H\psi = E\psi$ .

### Références

- [1] Grégoire ALLAIRE. Analyse numérique et optimisation. Eds de l'École Polytechnique, 2007
- [2] Lalit K. Sharma, Pearson V. Luhanga and Samuel Chimidza Potentials for the Klein-Gordon and Dirac Equations, Chiang Mai J. Sci. 2011; 38(4) : 514-526.
- [3] A. R. Curtis; Coulomb Wave Functions vol.11 Royal Soc. Math. Tables (Cambridge University Press, London, 1964) 9–25.
- [4] F. Salvat, J.M. Fernandez-Varea and W. Williamson, Jr.
- [5] K. L. Bell and N. S. Scott; Comp. Phys. Comm. 20 (1980) 447–458.
- [6] A. R. Barnett; Comp. Phys. Comm. 27 (1982) 147–166 .
- [7] C. Bardin, Y. Dandeu, L. wxGauthier, J. Guillermin, T. Lena, J.-M. Pernet, H. H. Wolter and T. Tamura; Comp. Phys. Comp. 3 (1972) 73–87 .

# Conclusion générale

Ce travail de mémoire entre dans le cadre de la préparation d'un diplôme de master en physique numérique et a été pour moi l'occasion d'aborder un certain nombre de solutions de l'équation de Dirac *via* des calculs numériques.

Avec l'invention de l'ordinateur, qui a permis d'élargir largement les possibilités d'applications, la programmation est devenue l'un des étapes essentielles pour déterminer la solution de beaucoup de problème non seulement en physique mais dans toutes les sciences.

L'équation de Dirac était notre premier pas d'aborder ce travail d'une manière rigoureuse. Sa solution numérique nous renseigne sur l'état de la fonction d'onde ainsi que sur sa densité de probabilité *via* des potentiels de type Coulombien et afin de réaliser cet objectif nous avons dans un premier temps réécrit l'équation de Schrödinger et l'équation de Klein Gordon *via* le langage de la théorie quantique des champs pour pouvoir les quantifier selon l'écriture de leurs hamiltoniens qui n'est autre que l'intégrale de sa densité réécrite en termes d'opérateurs de création et d'annihilation agissant sur un espace de Fock. Cette forme nous a permis de réduire le hamiltonien à une quantité quantique accessible à la résolution.

Nous avons levés l'indétermination qui a été mené par Klein Gordon en termes de densité négative et processus d'énergie négative en s'inspirant de l'idée de Dirac d'où équation de Dirac et phénomène de l'antimatière.

Notre dernière étape était basée sur la programmation où on écrit des programmes inspirés par le langage fortran 77 et à ce stade nous avons pu résoudre cette fameuse équation d'une manière numérique.

Enfin nous avons présentés nos résultats numériques via d'autres travaux donnés par la référence [1] où la conclusion était un bon accord avec ces derniers.

Cette résolution est amené à déduire des équations de types différentielles notamment l'équation de Dirac où le nombre d'itérations nécessaires peut atteindre une grande valeur. Cela vient du fait qu'il faut choisir une base ou ici nous avons commencé par le cas où la particule était libre. Nous avons construit une base obéissant aux deux relations fondamentales relation d'orthogonalisation et relation de fermeture des fonctions propres de l'hamiltonien de Dirac libre ce qui est fastidieux. Avec cette méthode, le nombre d'itérations diminue, l'énergie est obtenue avec une précision bien respectée selon notre condition posée via l'écart.

Cela constitue donc un gain de temps précieux. Nous avons testés la méthode dans le cas d'un potentiel Coulombien ou nous avons traités le problème de la singularité avec précaution en utilisant le pas sur les énergies.

## Références

[1] Lalit K. Sharma, Pearson V. Luhanga and Samuel Chimidza Potentials for the Klein-Gordon and Dirac Equations, Chiang Mai J. Sci. 2011; 38(4) : 514-526

## Appendice

Le calcul des matrices  $\gamma^\mu$  repose sur les démonstrations suivantes *via* leurs propriétés :

$$\gamma^{0+} = \gamma^0, (\gamma^0)^2 = I \quad (A-1)$$

$$\gamma^{i+} = -\gamma^i, (\gamma^i)^2 = -I (i = 1,2,3) \quad (A-2)$$

$$\gamma^{\mu+} = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 \Rightarrow \gamma^{\mu+} \gamma^0 = \gamma^0 \gamma^\mu \quad (A-3)$$

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\rho\nu} I \quad (A-4)$$

$$[\gamma^\rho, [\gamma^\mu, \gamma^\nu]] = 4(g^{\rho\nu} \gamma^\mu - g^{\nu\rho} \gamma^\mu) \quad (A-5)$$

$$(\gamma^5)^2 = II, \gamma^{5+} = \gamma^5 \quad (A-6)$$

$$\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0 \quad (A-7)$$

De même elle vérifiait :

$$\gamma^\mu \gamma_\mu = 4I \quad (A-8)$$

$$\gamma^\mu \gamma_\nu \gamma_\mu = -2\gamma_\nu \quad (A-9)$$

$$\gamma^\mu \gamma_\nu \gamma_\rho \gamma_\mu = 4g_{\nu\rho} I \quad (A-10)$$

$$\gamma^\mu \gamma_\nu \gamma_\rho \gamma_\sigma \gamma_\mu = -2\gamma_\sigma \gamma_\rho \gamma_\nu \quad (A-11)$$

$$\gamma^\mu \sigma_{\alpha\beta} \gamma_\mu = 0 \quad (A-12)$$

Où  $\sigma_{\alpha\beta}$  est le tenseur antisymétrique défini par :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{i}{2} [\gamma_\alpha, \gamma_\beta] \quad (A-13)$$

Les matrices  $\gamma$  satisfont également les propriétés de trace suivantes :

$$\text{Tr} [\gamma^\mu \gamma^\nu] = 4g^{\mu\nu} \quad (\text{A-14})$$

$$\text{Tr} [\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma] = 4(g^{\mu\nu} g^{\rho\sigma} - g^{\mu\rho} g^{\nu\sigma} + g^{\mu\sigma} g^{\nu\rho}) \quad (\text{A-15})$$

$$\text{Tr} [\gamma^{\mu_1} \gamma^{\mu_2} \dots \gamma^{\mu_{2n+1}}] = 0 \quad (\text{A-16})$$

$$\begin{aligned} & \text{Tr} [\gamma^{\mu_1} \gamma^{\mu_2} \dots \gamma^{\mu_{2n}}] \\ &= g^{\mu_1 \mu_2} \text{Tr} [\gamma^{\mu_3} \gamma^{\mu_4} \dots \gamma^{\mu_{2n}}] - g^{\mu_1 \mu_2} \text{Tr} [\gamma^{\mu_3} \gamma^{\mu_4} \dots \gamma^{\mu_{2n}}] + \dots \\ &+ (-1)^k g^{\mu_1 \mu_k} \text{Tr} [\gamma^{\mu_2} \gamma^{\mu_3} \dots \gamma^{\mu_{k-1}} \gamma^{\mu_{k+1}} \dots \gamma^{\mu_{2n}}] \\ &+ g^{\mu_1 \mu_{2n}} \text{Tr} [\gamma^{\mu_1} \gamma^{\mu_2} \dots \gamma^{\mu_{2n-1}}] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A-17})$$

Calcul de trace on vérifie que :

$$\text{Tr} [\gamma^5] = 0 \quad (\text{A-18})$$

$$\text{Tr} [\gamma^\mu \gamma^5] = 0 \quad (\text{A-19})$$

$$\text{Tr} [\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^5] = 0 \quad (\text{A-20})$$

$$\text{Tr} [\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^5] = 0 \quad (\text{A-21})$$

$$\text{Tr} [\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma \gamma^5] = 4i\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \quad (\text{A-22})$$

### Propriétés des spineurs

Les spineurs vérifien

$$\begin{aligned} \bar{u}_s u_r &= 2m\delta_s^r \\ \bar{v}_s v_r &= -2m\delta_s^r \end{aligned} \quad (\text{A-23})$$

Où  $s$  et  $r$  sont des indices de spin et  $\delta_s^r$  est le symbol de kronecker.

Et obéissent aussi à la relation :

$$\sum_{s=1}^2 u_s \bar{u}_s = (\not{p} + m) \text{ et } \sum_{s=1}^2 v_s \bar{v}_s = (\not{p} - m) \quad (\text{A-24})$$

leurs produit de ces est nul.

D'autre on peut montrer que :

$$(\not{p} \pm m)^2 = 2m(\not{p} \pm m) \quad (\text{A-25})$$

les quadrivecteurs courants pour une particule et une antiparticule libre décrites par l'équation de Dirac peuvent être obtenue à partir de l'expression des spineurs de Dirac  $u_1$  et  $u_2$  pour la particule et  $v_1$  et  $v_2$  pour l'antiparticule. En effet on a :

$$\bar{u}_s \gamma^\mu u_r = 2p^\mu \delta_s^r \quad (\text{A-26})$$

Où  $s$  et  $r$  sont les indices de spin prenant les valeurs 1 et 2 et  $\delta_s^r$  est le symbol de Kronecker.

Ainsi les courants  $\bar{u}_1 \gamma^\mu u_1$ ,  $\bar{u}_2 \gamma^\mu u_2$  pour la particule et  $\bar{v}_1 \gamma^\mu v_1$ ,  $\bar{v}_2 \gamma^\mu v_2$  pour l'antiparticule sont chacun proportionnel au quadrivecteur énergie-impulsion de la particule ou de l'antiparticule.

# Résumé

Notre objectif dans le présent travail est de résoudre l'équation de Dirac en présence d'un potentiel colombien. Dans un premier temps, nous avons déterminé sa solution pour un potentiel nul. Dans un second temps, nous allons donner une solution pour deux cas: l'un, lorsque nous négligeons la première dérivée d'une certaine quantité, exprimée en fonction de l'inverse de la fonction généralisée  $g(r, z, c, e)$ , Et la seconde, nous prenons en compte la première dérivée pour toutes les quantités. Enfin, nous avons interprété nos résultats et comparé à d'autres travaux.

# Abstract

Our aim in the present work is to solve the Dirac equation in the presence of a Colombian potential. For the first time, we determined its solution for zero potential. In the second time, we shall give a solution for two cases: one, when we neglect the first derivative of a certain quantity, which is expressed as a function of the inverse of the generalized function  $g(r, z, c, e)$ , and the second, we take into account the first derivative for all quantities. finally, We have interpreted our results and compared to other works.