M2/CFP/Parcours de Physique Théorique
Invariances en physique et théorie des groupes

Zitterbewegung et transformation de Foldy-Wouthuysen

Dans ce TD nous allons tenter de donner une interprétation physique des opérateurs apparaissant dans le théorie de Dirac. Après avoir mis en évidence la difficulté de définir l'opérateur vitesse dans l'équation de Dirac, et montré que la difficulté vient des solutions d'énergie négative, nous examinerons la solution proposée par Foldy et Wouthuysen, ce qui nous permettra de définir des opérateurs de position et de spin moyen ayant de bonne propriétés lorsque l'on passe à la limite non relativiste. Nous examinerons ensuite la limite ultra relativiste de l'équation de Dirac.
Puis nous étudierons le développement non relativiste de l'hamiltonien de Dirac dans le cas d'un couplage minimal avec un champ électromagnétique dans le formalisme de la transformation de Foldy et Wouthuysen.

1 Opérateur de vitesse

1) En utilisant la représentation de Heisenberg, calculer la vitesse d'un électron de Dirac libre. En déduire que cette définition de la vitesse n'est pas physiquement raisonable.

2) Nous allons maintenant montrer que cette définition de l'opérateur vitesse coïncide avec la vitesse usuelle si l'on se restreint aux états d'énergie positive.
Soient $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ deux états propres de H, de valeurs propres respectives E_1 et E_2.
a) Montrer que $\langle\psi_1|\vec{P}|\psi_2\rangle = 0$ si $E_1 \neq E_2$.

b) En prenant l'élément de matrice de $\{\alpha_i, H\}$, montrer que $\langle\psi_1|\vec{\alpha}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\vec{P}/H|\psi_2\rangle$ sauf pour $E_2 = -E_1$, ce qui prouve le résultat annoncé.

3) *Non-conservation du moment orbital*

Pour un électron de Dirac libre, le moment orbital $\vec{L}$ et le spin $\vec{S}$ ne sont pas conservés séparément: seul le moment cinétique total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ est constant. Montrer que

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\alpha} \wedge \vec{P}. \tag{1}$$

En déduire que $\vec{L}$ est conservé si l'on se restreint aux états d'énergie positive.

4)(*) Evolution de l'opérateur vitesse au cours du temps

Montrer que

$$\frac{d\vec{\alpha}}{dt} = -2i(\vec{\alpha}H - \vec{P})\,. \tag{2}$$

En intégrant cette équation, en déduire $\vec{\alpha}(t)$ puis $\vec{r}(t)$. Montrer que $\vec{r}(t)$ est la somme du résultat classique et d'un terme représentant un mouvement d'oscillation rapide provenant des élements de matrice de $\vec{\alpha}$ d'énergie opposée. Ce mouvement supplémentaire porte le nom de Zitterbewegung.

5) Nous allons donner un autre éclairage au Zitterbewegung en tentant de fabriquer un paquet d'onde qui soit une superposition uniquement de solutions d'énergie positive.
Soit $\Psi^{(+)}(x)$ la fonction d'onde définie par

$$\Psi^{(+)}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{m}{E}\sum_{\alpha=1,2} b(p,\alpha)\, u^{(\alpha)}(p)\, e^{-ip.x}\,. \tag{3}$$

a) Ecrire la contrainte satisfaite par b pour que $\Psi^{(+)}(x)$ soit normalisée. On pourra utiliser l'identité

$$u^{(\alpha)\dagger}(p)\, u^{(\alpha')}(p) = \frac{E}{m}\delta^{\alpha\alpha'}\,, \tag{4}$$

que l'on justifiera.

b) Calculer le courant de probabilité $\vec{J}^{(+)}$.

c) Montrer l'identité de Gordon

$$\bar{u}^{(\alpha)}(p)\,\gamma^{\mu}\,u^{(\beta)}(q) = \frac{1}{2m}\bar{u}^{(\alpha)}(p)[(p+q)^{\mu} + i\sigma^{\mu\nu}(p-q)_{\nu}]u^{(\beta)}(q)\,. \tag{5}$$

rem: cette identité est très utile pour simplifier des éléments de matrice faisant intervenir des couplages fermions bosons où le boson émis est "mou," c'est-à-dire que son impulsion k est très petite devant celle du fermion incident (approximation dite eikonale, courante en QED et en QCD).

d)En déduire que

$$\vec{J}^{(+)} = \left\langle \frac{\vec{p}}{E} \right\rangle\,. \tag{6}$$

Ainsi le courant total dû à la superposition des solutions d'énergie positive est simplement le produit de la masse par la vitesse de groupe.

e) Nous allons montrer maintenant que l'hypothèse d'une superposition restreinte aux solutions d'énergie positive est incohérente.
Considérons un paquet d'onde gaussien au temps $t = 0$:

$$\Psi(0,\vec{x}) = \frac{1}{(\pi d^2)^{3/4}} e^{-\vec{x}^2/2d^2}\, w\,, \tag{7}$$

où w est un spineur à 4 composantes, noté $\begin{pmatrix} \phi \\ 0 \end{pmatrix}$.
La solution normalisable correspondante de l'équation de Dirac s'écrit

$$\psi(t,\vec{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{m}{E}\sum_{\alpha}[b(p,\alpha)u^{(\alpha)}(p)e^{-ip.x} + d^*(p,\alpha)v^{(\alpha)}(p)e^{ip.x}]\,. \tag{8}$$

(i) Exprimer $b(p,\alpha)$ et $d^*(p,\alpha)$ en fonction de $u^{(\alpha)\dagger}(p)$ et $v^{(\alpha)\dagger}(p)$.

(ii)(*) En déduire que les contributions d'énergie négative deviennent importante lorsque l'on essaie de localiser le paquet d'onde dans des regions d'espace de l'ordre de la longueur d'onde Compton $\hbar/mc$.

(iii) (**) Calculer le courant total associé au paquet d'onde (8). Montrer qu'il est la somme d'un terme faisant intervenir la vitesse de groupe et d'un terme réel oscillant, du type de celui rencontré à la question 4). Dans ce calcul, il pourra être utile de généraliser l'identité de Gordon (5) aux solutions dénergie négative.

2 Transformation de Foldy-Wouthuysen

Nous allons mettre en pratique les remarques faites précédemment, en séparant par une transformation canonique les composantes supérieures et inférieures d'un quadrispineur dans la représentation de Dirac. Dans cette représentation les particules massives d'énergie positive ont au repos uniquement des composantes supérieures, alors que les particules d'énergie négative n'ont que des composantes inférieures. Cette représentation est donc adaptée à l'étude de la limite non-relativiste. Ainsi dans l'équation de Pauli étudiée en cours, la petite composante (le bispineur inférieur) est négligeable devant la grande composante (le bispineur supérieur).

Au contraire, pour les particules de masse nulle, ou pour les particules massives dans la limite ultra-relativiste, il est judicieux de travailler dans la représentation chirale des matrices de Dirac, le mélange entre bispineur supérieur (bispineur non-pointé) et bispineur inférieur (bispineur pointé) se faisant uniquement par la parité, représentée par la matrice γ_0, qui peut-être violée dans certains cas (interaction faible par exemple), ce qui amène à considérer des particules décrites par des spineurs de Weyl.

2.1 Représentation non-relativiste

Plaçons nous dans la représentation de Dirac de l'algèbre de Clifford.
On définit comme impairs les opérateurs qui ont uniquement des éléments de matrice connectant les composantes supérieures et inférieures des fonctions d'onde, et comme pairs les opérateurs qui ne possèdent pas de tels éléments de matrice.

1) Vérifier que parmi les 16 matrices indépendantes dans la représentation de Dirac, les matrices $\mathbf{1}$, $\gamma_0 = \beta$, $\vec{\sigma} = \frac{1}{2i}[\vec{\alpha} \wedge \vec{\alpha}]$ et $\gamma_0\vec{\sigma} = \vec{\gamma}$ sont paires, alors que les matrices $\vec{\alpha}$, $\gamma_0\alpha$, γ_5 et $\gamma_0\gamma_5$ sont paires. Montrer que le produit de deux matrices paires ou impaires est paires, que le produit d'une matrice paire et d'une matrice impaire est impair, et que la matrice γ_0 commute avec les matrices paires et anticommute avec les matrices impaires.
En déduire une écriture de toute matrice comme la somme d'une matrice paire et d'une matrice impaire.

2) Le problème est de réécrire l'équation de Dirac sous une forme qui soit libre des opérateurs impairs, ce qui permettra de séparer clairement solution d'énergie positive et solutions d'énergie négative.
Soit la transformation canonique

$$\psi' = e^{iS}\psi \tag{9}$$

a) Ecrire le nouvel hamiltonien H' dans la nouvelle représentation en fonction de S et H..
On considère S de la forme

$$S = -\frac{i}{2m}\beta\vec{\alpha}.\vec{p}\,w\left(\frac{p}{m}\right)\,, \tag{10}$$

où $p = |\vec{p}|$.

b) Calculer e^{iS}.

c) En déduire que

$$H' = e^{2iS}H\,. \tag{11}$$

d) Montrer que H' ne contient plus d'opérateur impair à condition de choisir

$$w\left(\frac{p}{m}\right) = \frac{m}{p}\text{Arctan}\left(\frac{\mathrm{p}}{\mathrm{m}}\right) \tag{12}$$

e) En déduire l'expression de H' en fonction de $E_p = (m^2 + p^2)^{1/2}$.

f) On pose

$$\psi' = \phi' + \chi'\,, \tag{13}$$

avec

$$\phi' = \left(\frac{1+\beta}{2}\right)\psi', \quad \chi' = \left(\frac{1-\beta}{2}\right)\psi'\,. \tag{14}$$

Ecrire les deux équations découplées satisfaites par ϕ' et χ'.

Nous sommes donc arrivés à la forme désirée, puisque H' a la forme d'une somme directe de deux hamiltoniens non locaux (il fait intervenir des dérivées par rapport à $\vec{r}$ d'ordre infiniment élevé) agissant chacun respectivement sur les composantes supérieures et inférieures.

3) Considérons une fonction d'onde de la forme

$$\psi(\vec{x}) = \int u(\vec{p})\,e^{i\vec{p}.\vec{x}}d^3\vec{p} = \psi_+(\vec{x}) + \psi_-(\vec{x})\,, \tag{15}$$

où

$$\psi_+(\vec{x}) = \int \frac{1}{2}\left[1+\frac{\beta m+\vec{\alpha}.\vec{p}}{E_p}\right] u(\vec{p})e^{i\vec{p}.\vec{x}}d^3\vec{p} \tag{16}$$

$$\psi_-(\vec{x}) = \int \frac{1}{2}\left[1-\frac{\beta m+\vec{\alpha}.\vec{p}}{E_p}\right] u(\vec{p})e^{i\vec{p}.\vec{x}}d^3\vec{p}. \tag{17}$$

a) Vérifier que $\psi_+(\vec{x})$ et $\psi_-(\vec{x})$ représentent respectivement les composantes d'énergie positive et négative de ψ.

b) Montrer que la transformation de Foldy-Wouthuysen peut s'écrire

$$e^{iS} = \frac{\beta\{\beta m+\vec{\alpha}.\vec{p}+\beta E_p\}}{[2E_p(E_p+m)]^{1/2}}\,. \tag{18}$$

c) En déduire que

$$\psi'_+ = e^{iS}\psi_+ = \left(\frac{1+\beta}{2}\right)\int \frac{1}{2}\left[\frac{2E_p}{E_p+m}\right]^{\frac{1}{2}}\left[1+\frac{\beta\, m+\vec{\alpha}.\vec{p}}{E_p}\right] u(\vec{p})e^{i\vec{p}.\vec{x}}d^3\vec{p} \tag{19}$$

$$\psi'_- = e^{iS}\psi_- = \left(\frac{1-\beta}{2}\right)\int \frac{1}{2}\left[\frac{2E_p}{E_p+m}\right]^{\frac{1}{2}}\left[1-\frac{\beta\, m+\vec{\alpha}.\vec{p}}{E_p}\right] u(\vec{p})e^{i\vec{p}.\vec{x}}d^3\vec{p}. \tag{20}$$

Nous pouvons donc identifier ψ'_+ avec ϕ' et ψ'_- avec χ'. Ainsi la transformation construite conduit à une représentation dans laquelle les composantes supérieures correspondent aux énergies positives et les composantes inférieures correspondent aux énergies négatives.

d) Etalement du paquet d'onde

Déterminer le noyau K qui vérifie

$$\psi'(\vec{x}) = \int K(\vec{x},\vec{x}')\psi(\vec{x}')d^3\vec{x}'\,. \tag{21}$$

e) (*) Montrer que dans la limite où l'échelle de résolution spatiale est grande devant la longueur de Compton, la fonction d'onde est bien localisée.

4) *Opérateur de position moyenne*

a) (**) Montrer que l'opérateur de position s'écrit, dans la représentation de Foldy-Wouthuysen,

$$\vec{x}' = e^{iS}\vec{x}e^{-iS} = \vec{x} - \frac{i\beta\vec{\alpha}}{2E_p} + \frac{i\beta(\vec{\alpha}.\vec{p})\vec{p} - [\vec{\sigma}\wedge\vec{p}]E_p}{2E_p^2(E_p+m)}. \tag{22}$$

b) Calculer l'opérateur $\vec{X}$ dans l'ancienne représentation dont le représentant dans la représentation de Foldy-Wouthuysen est $\vec{X}' = \vec{x}$.

c) Calculer les commutateurs $[X_i, X_j]$ et $[X_i, p_j]$.

Quel est l'opérateur représentant $\vec{p}$ dans la représentation de Foldy-Wouthuysen?

Montrer que $\vec{X}$ se transforme comme un vecteur sous les rotations.

d) Montrer que l'opérateur $\frac{d\vec{X}}{dt}$ est bien l'opérateur vitesse usuel. Calculer cet opérateur dans la nouvelle représentation et vérifier qu'il a les mêmes propriétés.

Les opérateurs $\vec{X}$ et $\vec{X}'$ sont les opérateurs position moyenne respectivement dans l'ancienne et la nouvelle représentation.

5) *Opérateur de spin moyen*

Dans l'ancienne représentation, les opérateurs de moment cinétique orbital $\vec{x} \wedge \vec{p}$ et de spin $\frac{1}{2}\vec{\Sigma}$ ne sont pas séparément des constantes du mouvement, alors que le moment cinétique total est conservé.

(i) Exprimer l'opérateur de moment cinétique orbital moyen dont le représentant dans la nouvelle représentation est $\vec{X}' \wedge \vec{p} = \vec{x} \wedge \vec{p}$
(ii) (**) Exprimer de même l'opérateur de spin moyen $\vec{\Sigma}_M$ dont le représentant dans la nouvelle représentation est $\vec{\Sigma}$.
(iii) Montrer que ces opérateurs sont séparément des constantes du mouvement.

2.2 Représentation ultra-relativiste

Déterminer la transformation S' pour que les termes pairs disparaissent du hamiltonien. Ecrire le hamiltonien H'' correspondant.

3 Particule de Dirac dans un champ électromagnétique extérieur

Dans le cas d'un fermion en interaction, il n'est plus possible d'écrire une transformation de Foldy-Wouthuysen exacte. En outre, si le champ électromagnétique dépend du temps, S pourra également en dépendre. On va donc procéder à un développement en puissances de v/c, i.e en puissances de p/m.

On écrit H sous la forme

$$H = \beta m + \mathcal{E} + \mathcal{O} \tag{23}$$

où $\mathcal{E} = eA^0(x)$ et $\mathcal{O} = \vec{\alpha}.\left(\vec{p} - e\vec{A}(x)\right)$.

On suppose que $e\vec{A}$ est au plus de l'ordre de grandeur de p et que eA^0 est au plus de l'ordre de grandeur de l'énergie cinétique, soit $\frac{p^2}{m}$. $\mathcal{O}$ sera donc considéré comme un infiniment petit du premier ordre dans H et $\mathcal{E}$ comme un infiniment petit du second ordre.

1) Quelle est l'expression de S dans le cas libre au premier ordre en p/m? En déduire qu'il est naturel de choisir

$$S = -i\beta \frac{\mathcal{O}}{2m} \tag{24}$$

dans le cas avec interaction.

2) Démontrer que

$$e^A\, B\, e^{-A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}[A, [A, [...[A, B]]...]] \tag{25}$$

où dans le terme générique de la somme A apparaît n fois (on pourra considérer la fonction $e^{sA}\, B\, e^{-sA}$.

3) Calculer le transformé H' jusqu'au quatrième ordre inclus en p/m et montrer qu'il se met sous la forme

$$H' = \beta m + \mathcal{E}' + \mathcal{O}' \tag{26}$$

avec

$$\mathcal{E}' = \beta \left(\frac{\mathcal{O}^2}{2m} - \frac{\mathcal{O}^4}{8m^3} \right) + \mathcal{E} - \frac{1}{8m^2}[\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] - \frac{i}{8m^2}[\mathcal{O}, \dot{\mathcal{O}}] \tag{27}$$

qui est un opérateur pair et

$$\mathcal{O}' = \frac{\beta}{2m}[\mathcal{O}, \mathcal{E}] - \frac{\mathcal{O}^3}{3m^2} + \frac{i\beta\dot{\mathcal{O}}}{2m} \tag{28}$$

qui est un opérateur impair du troisième ordre en p/m. Montrer que l'on peut se débarrasser de $\mathcal{O}'$ en faisant en deuxième transformation de Foldy-Wouthuysen, et qu'il reste alors, au quatrième ordre,

$$H'' = \beta m + \mathcal{E}'\,. \tag{29}$$

4) Expliciter les termes du deuxième ordre dans le cas général. Que reconnaît-on?

5) Expliciter les termes du quatrième ordre en fonction du champ électrique $\vec{E}$.

6) Dans le cas particulier où le champ est purement électrostatique et possède une symétrie sphérique (cas de l'atome d'hydrogène), montrer que la correction se met sous la forme

$$\Delta H = -\beta \frac{p^4}{8m^3} + \frac{e}{4m^2} \frac{1}{r} \frac{\partial A^0}{\partial r} \vec{\sigma}.\vec{L} - \frac{e}{8m^2} \vec{\nabla}.\vec{E}\,. \tag{30}$$

Interpréter ces différents termes. Montrer en particulier que le mouvement dans un champ électrique à une vitesse $\vec{v}$ donnerait lieu à un couplage spin-orbite 2 fois plus grand. L'écart est dû à la précéssion de Thomas (voir TD).

Le dernier terme correctif est appelé terme de Darwin. En calculant les fluctuations de l'énergie électrostatique dues aux fluctuations de la position de l'électron sur des distances de l'ordre de la longueur d'onde de Compton, interpréter ce terme.

Pour en savoir plus:

C. Itzykson et J.B. Zuber, *Quantum Field Theory*, 60-62 et 69-72.

S.S. Schweber, *Relativistic Quantum Field Theory*, Harper & Row, 91 (1961) .

T.D. Newton et E.P. Wigner, Localized States for Elementary Systems, Rev. of Mod. Phys., vol **21**, 400-406 (1949).

L.L. Foldy et S.A. Wouthuysen, *On the Dirac Theory of Spin 1/2 Particles and Its Non-Relativistic Limit*, Phys. Rev. **78**, 29-36 (1949).

M. Cini et B. Touschek, The Relativistic Limit of Theory of Spin 1/2 Particles, Il Nuovo Cimento, vol **VII**, 422-423 (1958).

S.K.Bose, A. Gamba et E.C.G. Sudarshan, Representations of the Dirac Equation, Phys. Rev. **113**, 1661-1663, (1959)