

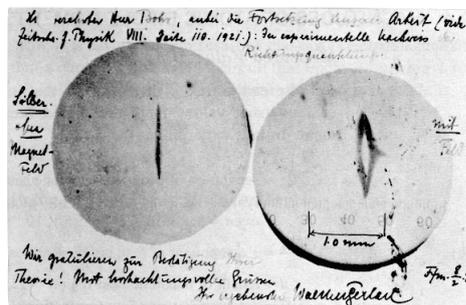
Le spin

1. Pourquoi le spin ? Non-complétude de la description pré-spin de l'électron dans le magnétisme.

La description de l'électron par une seule fonction d'onde de trouve insuffisante pour décrire certains phénomènes, en particulier magnétiques. Cela conduit à la nécessaire introduction d'un *degré de liberté interne*, attribut intrinsèque (comme sa charge), et sans équivalent classique : le **spin**.

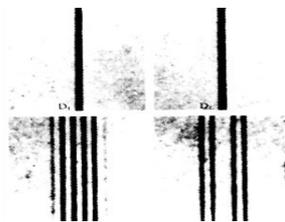
Montrons comment faire émerger ce moment angulaire intrinsèque à partir des expériences historiques :

- **Expérience de Stern et Gerlach** : Un moment angulaire orbital des atomes d'argent, quantifié avec ℓ entier, aurait pu expliquer un moment magnétique quantifié et donc l'apparition de tâches en nombre *impair* ($2\ell+1$ valeurs de m). Mais le nombre de tâche est *pair* ! Ce qui exclut le moment angulaire orbital dans cet effet.



De toute façon, les atomes d'argent sont dans l'état fondamental ($\ell = 0$, à symétrie sphérique). Il ne peut donc pas y avoir de moment magnétique permanent d'origine orbitale.

- **Effet Zeeman « anormal »** : splitting des raies spectrales en nombre *pair* de raies :



Autant le splitting en nombre *impair* s'explique¹ avec le moment magnétique orbital par le couplage $-\vec{\mu}_o \cdot \vec{B}$ levant la dégénérescence en m_ℓ , autant le splitting en nombre pair est inexpliqué sans prendre en compte un moment magnétique intrinsèque avec $\vec{\mu}_{\text{tot}} = \vec{\mu}_o + \vec{\mu}_s$.

- On est donc contraint à accepter l'existence d'un **moment magnétique propre** à l'électron, $\vec{\mu}_s$.
- **Structure fine** atomique, argument dans un cadre classique :

Tout comme une particule chargée en mouvement subit une force dans un champ magnétique, un moment magnétique $\vec{\mu}$ se déplaçant à la vitesse \vec{v} (de moment angulaire $\vec{L} = m \vec{v} \times \vec{r}$) subit une force $\vec{F} = \mu \vec{v} \times \vec{E}$, qui donne lieu à une énergie d'interaction moment-orbite

$$f(r) \vec{\mu} \cdot \vec{L} \quad \text{avec} \quad f(r) = \frac{1}{2mc^2} \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr}$$

dans un champ électrique central de potentiel $\Phi(r)$, comme dans un atome; ce qui se montre dans un cadre classique en se mettant dans le référentiel de l'électron².

1. Et s'explique même dans l'Ancienne Théorie des Quanta.

2. Où le mouvement du proton ($= -\vec{v}$) crée un champ magnétique $\vec{B} = -\frac{\mu_0 e}{4\pi} \frac{\vec{v} \times \vec{r}}{r^3} = \frac{e}{m c^2 4\pi \epsilon_0} \frac{\vec{L}}{r^3}$. Aslangul §20.1.

Le moment angulaire \vec{L} n'est alors *plus une constante du mouvement* (au moins si $\vec{\mu}$ l'est) :

$$\{H, L_i\} \propto \{\vec{\mu} \cdot \vec{L}, L_i\} \neq 0$$

ce qui semble violer l'isotropie de l'espace, l'atome étant isolé. Une façon de résoudre ce problème est d'affirmer que \vec{L} n'est *pas* le moment angulaire total, et d'introduire un **moment angulaire propre à l'électron**, \vec{S} , tel que son moment angulaire total soit

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad \text{avec} \quad \{\vec{\mu} \cdot \vec{L}, \vec{J}\} = 0$$

ce qui est bien vérifié si l'on prend

$$\vec{S} \propto \vec{\mu} \quad \text{et} \quad \{S_i, L_j\} = 0 \quad \forall i, j$$

Traduit dans le cadre quantique, le terme $\propto \vec{\mu}_s \cdot \vec{L}$ brise clairement l'invariance de l'atome par rotations, de générateur \vec{L} , pour la même raison : $[\vec{\mu}_s \cdot \vec{L}, L_i] \neq 0$. On introduit alors un moment angulaire propre à l'électron

$$\vec{S} \propto \vec{\mu}_s \quad \text{tel que} \quad [S_i, L_j] = 0 \quad \forall i, j$$

- Pour que les composantes de \vec{S} et \vec{L} commutent, on est mené à ne pas faire agir \vec{S} sur les degrés de liberté spatiaux. On étend alors l'espace des états :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{esp}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}$$

et la relation $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ se traduit alors en

$$\vec{J} = \vec{L} \otimes \mathbf{1}_{\text{spin}} + \mathbf{1}_{\text{esp}} \otimes \vec{S}$$

On peut retrouver³ cette relation avec le fait que le moment magnétique $\vec{\mu}_s$ (et donc \vec{S} par \propto) doit être un **opérateur vectoriel** par rapport au moment angulaire total, car on observe expérimentalement qu'il se transforme *comme un vecteur* dans les rotations. On montre alors⁴ que $\mathcal{R}_{\text{spin } \vec{u}, \theta} = e^{\theta \vec{u} \cdot \vec{S} / i\hbar}$, et comme on sait que $\mathcal{R}_{\text{esp } \vec{u}, \theta} = e^{\theta \vec{u} \cdot \vec{L} / i\hbar}$, une rotation agit comme

$$\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} = \mathcal{R}_{\text{esp } \vec{u}, \theta} \otimes \mathcal{R}_{\text{spin } \vec{u}, \theta} = e^{\frac{1}{i\hbar} \theta \vec{u} \cdot (\vec{L} \otimes \mathbf{1}_{\text{spin}} + \mathbf{1}_{\text{esp}} \otimes \vec{S})} =: e^{\frac{1}{i\hbar} \theta \vec{u} \cdot \vec{J}}$$

\vec{S} étant un moment angulaire, \vec{J} l'est aussi (même relations de commutation), et il est quantifié tout comme \vec{L} : on note (s, m_s) les nombres quantiques associés. Le spin est alors un **nouveau degré de liberté, interne à l'électron**. Puisque l'on observe deux tâches dans l'expérience de Stern et Gerlach, on amène à fixer $s = 1/2$, et alors $m_s \in \{\pm 1/2\}$. On peut alors représenter l'état de l'électron par une fonction d'onde ayant un degré de liberté supplémentaire :

$$\Psi(\vec{x}, m_s, t) \quad \text{ou par} \quad \begin{bmatrix} \Psi_+(\vec{x}, t) \\ \Psi_-(\vec{x}, t) \end{bmatrix}$$

- Cette idée se marie bien avec l'observation de la **polarisation des électrons** dans les expériences de diffusion⁵ : si le faisceau d'électrons était un scalaire et que la cible est isotrope ou à symétrie sphérique, on s'attend à ce que l'intensité diffusée I ne dépende que de l'angle de diffusion θ , et pas de l'angle azimutal ϕ (la diffusion est invariante par rotation autour de l'axe du faisceau).

3. Si l'on admet que $\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} = e^{\theta \vec{u} \cdot \vec{J} / i\hbar}$. Inversement, on peut justifier $\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} = e^{\theta \vec{u} \cdot \vec{J} / i\hbar}$ par le fait que $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ et que $\mathcal{R}_{\text{spin } \vec{u}, \theta} = e^{\theta \vec{u} \cdot \vec{S} / i\hbar}$ (à cause de la transformation de $\vec{\mu}$) et que $\mathcal{R}_{\text{esp } \vec{u}, \theta} = e^{\theta \vec{u} \cdot \vec{L} / i\hbar}$.

4. Aslangul §17.3.2 Rq 1

5. During the scattering, the spin may change its direction due to spin-orbit coupling : the electron "sees" in its rest frame the moving charge of the scattering center; that means it sees a current and thus a magnetic field, which acts upon its magnetic moment and may change its spin direction (spin-flip amplitude).

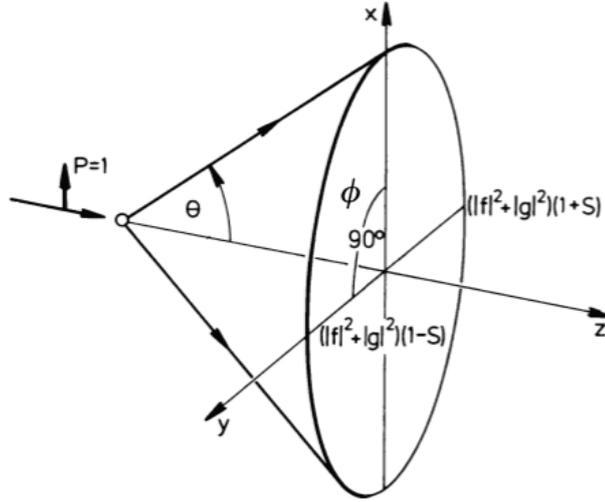


Figure 1. Asymétrie "gauche-droite" de diffusion d'un faisceau d'électrons totalement polarisé dans la direction x . L'intensité diffusée est de la forme $I(\theta, \phi) \propto 1 - S(\theta) \sin(\phi)$.

Or, dans certaines préparations, on observe une dépendance en ϕ , de la forme

$$I(\theta, \phi) = a(\theta) + b(\theta) \cos \phi$$

(et non en $\cos^2 \phi$ comme pour des rayons X polarisés, ce qui indique le comportement spinoriel et non vectoriel de la fonction d'onde étendue lors d'une rotation⁶). Un faisceau, même homogène et spatialement isotrope, n'est pas invariant par rotation autour de son axe lorsqu'il est polarisé.

Ainsi, il est impossible d'admettre l'existence d'un moment magnétique propre de l'électron non lié à un moment angulaire, tout en voulant préserver la conservation obligatoire du moment angulaire d'un système isolé. L'existence avérée expérimentalement du moment magnétique de l'électron, alliée à la symétrie imposée par l'isotropie, force à admettre l'existence du spin de l'électron.

2. Le spin en mécanique quantique non relativiste

2.1. Définition du spin

Moment angulaire intrinsèque \vec{S} d'un système quantique, c'est à dire vérifiant l'algèbre de Lie

$$\boxed{[\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_j] = i\hbar \mathbf{A}_{ijk} \mathbf{S}_k} \iff \vec{S} \times \vec{S} = i\hbar \vec{S}$$

Comme tout moment angulaire, il est *quantifié* : les états propres $|sm_s\rangle$ de (\vec{S}^2, S_z) vérifient

$$\vec{S}^2 |sm_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |sm_s\rangle \quad \text{et} \quad S_z |sm_s\rangle = \hbar m_s |sm_s\rangle \quad \text{avec} \quad s \in \frac{1}{2} \mathbb{N} \quad \text{et} \quad \{m_s\} = \llbracket -s, +s \rrbracket$$

Le module du spin d'un système donné, $\langle \vec{S}^2 \rangle = \hbar^2 s(s+1)$, est en général *fixé*. On dit alors que le **système est de spin s** . Le nombre quantique m_s joue alors le rôle d'un *degré de liberté interne* au système quantique, et \vec{S} agit alors dans un espace

$$\boxed{\mathcal{H}_{\text{spin } s} = \{|m_s\rangle\}_{m_s \in \llbracket -s, +s \rrbracket} \text{ de dimension } 2s+1}$$

6. Si le comportement était vectoriel, on aurait une dépendance en $\cos \phi$ dans $\Psi(r, \theta, \phi, m_s)$, et donc en $\cos^2 \phi$ dans $I(\theta, \phi) \propto |\Psi(\theta, \phi)|^2$, l'intensité étant liée au carré de la fonction d'onde. À cause du comportement spinoriel, on ne peut visiblement pas déduire le vecteur de polarisation directement de la fonction d'onde.

Le spin est *sans équivalent classique* puisque s est fixé et que $\langle \vec{S}^2 \rangle \rightarrow 0$ lorsque $\hbar \rightarrow 0$.

[sûrement des trucs à rajouter]

2.2. Le spin $1/2$

Sur la base $\{|\pm_z\rangle := |1/2, \pm 1/2\rangle\}$ d'états propre de S_z dans l'espace $s = 1/2$, \vec{S} peut s'écrire

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad \text{avec} \quad \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

les **matrices de Pauli**, où $|+_z\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ et $|-_z\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$. Sur cette base, on peut écrire les états propres de S_y et S_z comme

$$|\pm_x\rangle = \frac{|\uparrow\rangle \pm |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{et} \quad |\pm_y\rangle = \frac{|\uparrow\rangle \pm i|\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

et plus généralement, les états propres de la projection $S_{\vec{u}} = \vec{S} \cdot \vec{u}$ du spin sur l'axe \vec{u} sont

$$|+\vec{u}\rangle \propto \begin{bmatrix} 1+u_z \\ u_x + i u_y \end{bmatrix} \propto \begin{bmatrix} 2 \cos^2 \frac{\theta}{2} \\ \sin \theta e^{i\phi} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad |-\vec{u}\rangle \propto \begin{bmatrix} -u_x + i u_y \\ 1+u_z \end{bmatrix} \quad \text{avec} \quad \vec{u} =: \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{bmatrix}_{\text{sph}/\bar{z}}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} |+\vec{u}\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |\downarrow\rangle \\ |-\vec{u}\rangle &= \sin \frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle - \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |\downarrow\rangle \end{aligned} \quad \text{avec} \quad S_{\vec{u}} |\pm\vec{u}\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\vec{u}\rangle$$

Si l'on oublie sa phase, tout état pur est de la forme $|+\vec{u}\rangle$ avec \vec{u} appartenant à la sphère unité :

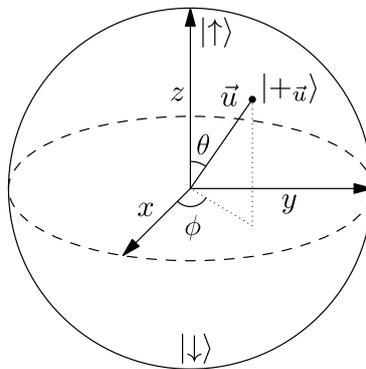


Figure 2. Sphère de Bloch : représentation des états purs d'un spin $1/2$, et plus généralement d'un système à deux niveaux (un qubit).

Autrement dit, l'espace des rayons ($\mathcal{H}_{\text{spin}1/2}$ quotienté par la relation d'équivalence $|a\rangle = \text{phase} \cdot |b\rangle$) est isomorphe à la sphère de Bloch S^2 . Mais attention, si l'on a deux spins, on ne peut pas ignorer leur phase relative, et on ne peut représenter les états de $\mathcal{H}_{\text{spin}1/2} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}1/2}$ dans deux sphères de Bloch.

Les opérateurs statistiques de $\mathcal{H}_{\text{spin}1/2}$ se mettent sous la forme générale

$$\chi_{\vec{u}} = \frac{1}{2} (1 + \vec{u} \cdot \vec{\sigma})$$

où \vec{u} est un vecteur de la *boule* de Bloch. Pour un état pur, $\|\vec{u}\| = 1$, le spin est totalement polarisé et d'entropie nulle. Pour un mélange statistique, il est de norme $\|\vec{u}\| < 1$. Pour $\vec{u} = \vec{0}$, le spin est non polarisé et d'entropie maximale.

2.3. Particule à spin

Une **particule de spin** s est décrite spatialement par une fonction d'onde dans \mathcal{H}_{esp} (ou noté \mathcal{H}_{orb}), à laquelle on ajoute le degré de liberté interne qu'est le spin, habitant de $\mathcal{H}_{\text{spin}}$:

$$\boxed{\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{esp}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}} \longrightarrow^7 \boxed{|\Psi\rangle = \sum_{m_s=-s}^{+s} \Psi(\vec{x}, m_s) \otimes |m_s\rangle \underset{\text{mat}}{=} \begin{bmatrix} \Psi(\vec{x}, +s) \\ \vdots \\ \Psi(\vec{x}, -s) \end{bmatrix}}$$

Puisque $\{|m_s\rangle\}_{m_s}$ forme une base orthonormale, un produit scalaire s'écrit sous la forme

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_{m_s=-s}^{+s} \int d^3\vec{x} \Phi^*(\vec{x}, m_s) \Psi(\vec{x}, m_s)$$

La densité de probabilité d'observer la particule en \vec{x}_0 avec⁸ la valeur $\hbar m_s$ pour S_z est alors

$$|\Psi(\vec{x}_0, m_s)|^2 \quad \text{avec la normalisation} \quad \sum_{m_s=-s}^{+s} \int d^3\vec{x} |\Psi(\vec{x}, m_s)|^2 = 1$$

Pour simplifier les notations, on identifie

$$\vec{S} \longleftrightarrow \mathbf{1}_{\text{esp}} \otimes \vec{S}, \quad \mathbf{x} \longleftrightarrow \mathbf{x} \otimes \mathbf{1}_{\text{spin}} \underset{\text{mat}}{=} \begin{bmatrix} \mathbf{x} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{x} \end{bmatrix}, \quad \vec{L} \longleftrightarrow \vec{L} \otimes \mathbf{1}_{\text{spin}}, \quad \dots$$

Puisque $\vec{L} = \vec{p} \times \vec{r}$ et \vec{S} agissent dans des espaces différents, leurs composantes commutent :

$$\boxed{[L_i, S_j] = 0} \quad \forall i, j$$

Le moment angulaire (comme somme de deux moments angulaires) total de la particule est

$$\boxed{\vec{J} = \vec{L} \otimes \mathbf{1}_{\text{spin}} + \mathbf{1}_{\text{esp}} \otimes \vec{S} \underset{\text{simpl.}}{=} \vec{L} + \vec{S}}$$

\implies Le spin d'une particule est son moment angulaire dans le référentiel où elle est au repos⁹.

Le moment orbital ne peut prendre que des valeurs $\ell \in \mathbb{N}$ entières, mais si le spin s est un demi-entier, le moment total *peut prendre des valeurs j demi-entières* d'après le théorème d'addition des moments angulaires.

\vec{L} et \vec{S} sont des *opérateurs vectoriels* par rapport à \vec{J} (mais pas l'un par rapport à l'autre) :

$$[J_i, L_j] = i\hbar \mathbb{A}_{ijk} L_k \quad \text{et} \quad [J_i, S_j] = i\hbar \mathbb{A}_{ijk} S_k$$

Le moment angulaire total est le générateur des rotations de la particule :

$$\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} = e^{\frac{1}{i\hbar} \theta \vec{u} \cdot \vec{J}} = e^{\frac{1}{i\hbar} \theta \vec{u} \cdot \vec{L}} \otimes e^{\frac{1}{i\hbar} \theta \vec{u} \cdot \vec{S}} \quad (1)$$

et est *conservé* dans un système isolé (isotropie de l'espace). \vec{L} et \vec{S} ne sont pas nécessairement conservés, par exemple dans l'interaction spin-orbite en physique atomique.

Puisque $\vec{S} = \vec{J} - \vec{L}$ et que le moment angulaire total ainsi que le moment angulaire orbital sont invariants par parité, le spin \vec{S} est aussi *invariant par parité* : $[\vec{S}, \mathbf{\Pi}] = 0$.

[sûrement des trucs à rajouter; jeter un œil sur le Bellac, où il construit tout à partir des symétries]

7. Par les lois de l'algèbre tensorielle.

8. L'observation simultanée de la position et du spin a un sens car $[\vec{x}, S_z] = 0$. La densité de probabilité de présence en \vec{x}_0 quelque soit le spin est $\rho(\vec{x}_0) = \sum_{m_s} |\Psi(\vec{x}_0, m_s)|^2$.

9. D'où les particularités du spin du "photon", qui n'est au repos dans aucun référentiel.

2.4. "Rotation" d'un spin

[§20.3 Aslangul]

On ne peut, il me semble, concrètement prendre une particule avec un spin et lui appliquer une rotation. Tout ce que l'on peut faire est effectuer un changement de référentiel, ou bien agir avec un champ magnétique via son moment magnétique (cf. <https://www.rpi.edu/dept/phys/Courses/PHYS6510/PhysRevLett.35.1053.pdf> ou mieux <http://users.physik.fu-berlin.de/~bab/teaching/physik3/SS2003/intern/SpinorPaper.pdf> pour une démonstration du caractère spinoriel d'un neutron), ou bien être dans un régime relativiste (couplage spin-orbite $\vec{L} \cdot \vec{S}$, couplage spin-rotation $\vec{\Omega} \cdot \vec{S}$ (cf. 10.1038/s41534-020-0254-8 pour des neutrons)...))

2.5. Moment magnétique associé au spin

[à mettre au propre; voir §20.7 Aslangul]

Moment magnétique total d'une particule avec spin :

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_o + \vec{\mu}_s \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \vec{\mu}_s = \gamma_s \vec{S} \\ \vec{\mu}_o = \gamma_o \vec{L} \end{cases} \quad \text{où} \quad \gamma = g \frac{q}{2m}$$

On a toujours $g_o = 1$ par le principe de correspondance avec le moment magnétique orbital en mécanique classique. Par contre, le moment magnétique de spin n'est plus proportionnel à $q/2m$:

$$g_{e,s} = +2(1 + \text{corr. QED}) \simeq +2.002 \quad ; \quad g_{p,s} \simeq +5.59 \quad ; \quad g_{n,s} \simeq -3.87$$

avec $q_e = -e$; avec $q_p = +e$; avec " $q = e$ "

Pour un électron (de spin $1/2$, $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$), on a alors¹⁰

$$\vec{\mu}_{e,s} = \gamma_{e,s} \vec{S} \simeq -\mu_B \vec{\sigma} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \text{ magnéton de Bohr} \\ \simeq +5.788 \cdot 10^{-5} \text{ eV/T} \\ \simeq h \cdot 1.400 \text{ MHz/G} \end{cases}$$

et

$$\vec{\mu}_e = \frac{e}{2m_e} (\vec{L} + g_{e,s} \vec{S})$$

[précession de larmor (fiche) + mettre au propre l'exo 20.8.7 sur la mesure de l'anomalie magnétique de l'e]

3. L'origine relativiste du spin ? Comment le spin émerge de l'équation de Dirac.

D'après Aslangul, non, le spin n'a, au fond, rien de relativiste :

La Théorie de l'électron de Dirac, contruite sur des bases relativistes, introduit spontanément un certain degré de liberté supplémentaire dont toutes les propriétés physiques autorisent qu'il soit identifié au spin $1/2$ de l'électron, avec $g_{e,s} = 2$. C'est pourquoi on a un temps parlé de l'*origine relativiste du spin* (au sens d'Einstein).

En réalité, le spin est associé au *spineurs*, introduits sur des considérations exclusivement basés sur l'analyse du groupe des *rotations*, n'ayant rien à voir avec la relativité d'Einstein. Le spin est sans doute inscrit dans la seule symétrie de rotation.

En fait, la théorie de Dirac est covariante par les transformations de Lorentz. Or le produit de deux boosts de Lorentz n'est en général *pas* un boost de Lorentz pure (non-additivité des vitesses), mais implique aussi une *rotation spatiale*. On est *forcé* à introduire le groupe de symétrie complet, y compris les rotations. Comme l'a montré Wigner, y sont alors incorporées explicitement toutes les nécessités liées à une telle symétrie, en particulier toutes les formes de représentation, de dimension impaire et paire, respectivement associées aux valeurs entières *et demi-entières* du moment angulaire.

10. On prend la charge élémentaire $e = |q_e| \simeq 1.602 \cdot 10^{-19}$ C positive, et le magnéton de Bohr aussi.

Une analyse plus profonde nécessite de travailler en QFT, la théorie de Dirac étant de toute façon défectueuse (mer de Dirac, hydrogénoïdes à $Z\alpha \sim 1$, paradoxe de Klein...).

L'équation de Klein-Gordon, d'ordre 2 en temps (le temps étant traité également à l'espace, car covariante) est incapable de décrire un unique électron car la densité ρ formée pour avoir $\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ peut être négative. On peut "diviser" la fonction d'onde en deux¹¹ pour passer à un système de deux équations couplées d'ordre 1 en temps. Mais la fonction d'onde à deux composantes alors formée ne peut pas décrire un spin $1/2$ car ces deux composantes ne jouent pas du tout un rôle symétrique : l'une est d'ordre 0 en $\frac{v}{c}$ alors que l'autre est d'ordre 1. La limite non relativiste produit donc une fonction d'onde à une seule composante.

Si on veut une équation covariante d'ordre 1 en temps, il faut qu'elle soit aussi d'ordre 1 en espace. Pour construire l'équation de Dirac, on est donc mené à "diviser" encore en deux la fonction d'onde pour finalement travailler sur une fonction d'onde à 4 composantes,

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{bmatrix} \quad \text{de densité} \quad \rho = \sum_{\mu} |\Psi_{\mu}|^2$$

L'équation la plus simple que l'on peut alors former est (dans un formalisme non covariant)

$$i\hbar \partial_t \Psi = \underbrace{(c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2)}_{H_{\text{Dirac}}} \Psi$$

avec

$$\alpha_i^2 = \mathbf{1}_4 \quad (\forall i) \quad \text{et} \quad \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 0 \quad (\forall i \neq j) \quad \text{et} \quad \beta^2 = \mathbf{1}_4 \quad \text{et} \quad \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \quad (\forall i)$$

pour respecter la relation

$$H_{\text{Dirac}}^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$$

On peut alors choisir n'importe quelle représentation de $\vec{\alpha}$ et β , dont la représentation standard

$$\vec{\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \beta = \begin{bmatrix} \mathbf{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_2 \end{bmatrix}$$

Pour une particule d'énergie potentielle V , on étend le hamiltonien de Dirac par

$$H = \begin{bmatrix} (mc^2 + V) \mathbf{1}_2 & c \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ c \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & (-mc^2 + V) \mathbf{1}_2 \end{bmatrix} = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 + V(\vec{r}) \mathbf{1}_4 \quad \text{où} \quad V = V(\vec{r})$$

Avant d'exploiter ces équations et de commencer les calculs, une brève analyse qualitative est utile, considérant le cas le plus simple d'une particule libre, (20.146). La structure de la matrice de H_D montre que dans la limite $\vec{p} \rightarrow 0$, les quatre composantes se découplent, deux d'entre elles ayant l'énergie $+mc^2$, les autres ayant l'énergie $-mc^2$; ce dernier résultat est surprenant, car on ne voit pas bien ce que peut représenter une telle solution à énergie *négative* : il s'agit là du premier symptôme de la difficulté foncière de la théorie de Dirac. Quand $\vec{p} \neq 0$, mais si $\|\vec{p}\|c \ll mc^2$, il n'y a pas de découplage au sens strict, mais on s'attend à ce que les énergies propres soit à nouveau voisines⁷⁷ de $\pm mc^2$; la fonction d'onde a cette fois quatre composantes non nulles, mais, visiblement, pour $E \sim +mc^2$, les deux premières seront grandes, les deux dernières seront petites ; l'inverse se produit pour l'autre solution $E \sim -mc^2$. C'est pourquoi, comme on le verra dans la suite, on parle respectivement dans chaque cas de *grandes* et de *petites* composantes.

11. Tout comme les deux équations de Hamilton sont une "division" en deux de l'équation de Lagrange pour un système classique; la différence est que on ne devrait pas avoir besoin de deux conditions initiales pour spécifier l'évolution de la fonction d'onde, et cette séparation en deux équations ne change rien à ça.

Ce point nécessaire étant acquis, on peut maintenant établir le premier résultat spectaculaire de la théorie de Dirac, à savoir l'apparition *spontanée* d'une observable qui va pouvoir être identifiée avec le spin de l'électron ; la suite montre en effet que l'opérateur :

$$\vec{\Sigma} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} \vec{\sigma} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vec{\sigma} \end{bmatrix} \quad (20.156)$$

a toutes les qualités requises pour assurer que le vecteur :

$$\vec{J} \stackrel{\text{def}}{=} \vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \quad (20.157)$$

qui se veut être un moment cinétique puisqu'il incorpore déjà le moment cinétique orbital, est effectivement une constante du mouvement lorsque le Hamiltonien est celui qui figure au second membre de (20.137), avec un champ sphérique $V(\vec{r}) \equiv V(r)$. Le terme potentiel $V(r)\mathbf{1}_4$ commute avec les matrices $\vec{\alpha}$ et β ; de surcroît, étant à symétrie

sphérique, il commute avec \vec{L} . Il en résulte que le commutateur $[\vec{J}, H_D]$ se réduit à $[\vec{J}, H_D] = [\vec{J}, c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2]$, exactement comme pour une particule *libre*.

Calculons d'abord le commutateur de \vec{L} avec la partie cinétique de H_D . Dans l'espace à 4 dimensions, le moment cinétique orbital est simplement :

$$\vec{L} = \begin{bmatrix} \mathbf{1}_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1}_2 \end{bmatrix} (\vec{r} \times \vec{p}) \equiv (\vec{r} \times \vec{p})\mathbf{1}_4, \quad (20.158)$$

puisque \vec{p} agit de la même façon sur chaque composante ($\vec{p}\Psi_\mu = -i\hbar\nabla\Psi_\mu$). Il en résulte :

$$[\vec{L}, H_D] = [(\vec{r} \times \vec{p})\mathbf{1}_4, c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2] = [(\vec{r} \times \vec{p})\mathbf{1}_4, c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}]. \quad (20.159)$$

Par exemple, on a :

$$[L_z, H_D] = c \left[xp_y - yp_x, \sum_u \alpha_u p_u \right] = i\hbar c (\alpha_x p_y - \alpha_y p_x) \equiv i\hbar c (\vec{\alpha} \times \vec{p})_z, \quad (20.160)$$

et de même pour les autres composantes, d'où :

$$[\vec{L}, H_D] = i\hbar c (\vec{\alpha} \times \vec{p}) \quad (20.161)$$

Physiquement, ceci signifie que \vec{L} n'est pas une constante du mouvement⁷⁸, laissant pressentir qu'une interaction du genre spin-orbite est déjà contenue dans le formalisme – quoique non encore apparente (elle ressortira lors de la séparation de la variable radiale, voir (20.204)). Par ailleurs⁷⁹ :

$$[\vec{\Sigma}, H_D] = \left[\begin{bmatrix} \vec{\sigma} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vec{\sigma} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} mc^2\mathbf{1}_2 & c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & -mc^2\mathbf{1}_2 \end{bmatrix} \right] = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & c[\vec{\sigma}, \vec{\sigma}\cdot\vec{p}] \\ c[\vec{\sigma}, \vec{\sigma}\cdot\vec{p}] & \mathbf{0} \end{bmatrix}. \quad (20.162)$$

On a, par exemple :

$$[\sigma_x, \vec{\sigma}\cdot\vec{p}] = [\sigma_x, \sum_u \sigma_u p_u] = 2i(p_y \sigma_z - p_z \sigma_y) \equiv 2i(\vec{p} \times \vec{\sigma})_x, \quad (20.163)$$

d'où :

$$[\vec{\Sigma}, H_D] = 2ic \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \vec{p} \times \vec{\sigma} \\ \vec{p} \times \vec{\sigma} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \equiv 2ic \vec{p} \times \vec{\alpha}. \quad (20.164)$$

À nouveau, ceci montre que \vec{S} n'est pas une constante du mouvement. Prenant maintenant en compte (20.161) et (20.164), le commutateur de \vec{J} défini en (20.157) avec le Hamiltonien de Dirac H_D est :

$$[\vec{J}, H_D] \equiv [\vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}, H_D] = i\hbar c (\vec{\alpha} \times \vec{p} + \vec{p} \times \vec{\alpha}) = 0. \quad (20.165)$$

Ce résultat permet bien d'interpréter $(\hbar/2)\vec{\Sigma}$ comme le moment cinétique intrinsèque de l'électron : ajouté vectoriellement au moment cinétique orbital \vec{L} pour former le moment

cinétique total \vec{J} , celui-ci est bien une constante du mouvement en présence d'un champ central. La théorie de Dirac engendre ainsi le spin sous la forme :

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} \vec{\sigma} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vec{\sigma} \end{bmatrix} \quad (20.166)$$

dans la représentation standard, le moment cinétique total étant $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

4. TODO

Théorème spin-statistique : bosons et fermions. Stabilité de la matière \Leftrightarrow existence d'une limite thermodynamique lors d'interactions attractives coulombiennes.

Spin de particules composées ?