République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université A.Mira Béjaia

Faculté des Sciences exactes

Département de Physique

Mémoire de Master

Rédigé par

ZEHOUANI Samra

En vue de l'obtention du diplôme de master en Physique

Spécialité *: Physique Théorique*

Intitulé

Solutions exactes de l'équation de Dirac pour des potentiels particuliers

Soutenu le 05/06/2016 devant le jury composé de :

Mr	**GHARBI Abdelhakim.**	*Président*	MCA	Béjaia
Mr	**BELABBAS Abdelmoumene**	*Examinateur*	MCB	Béjaïa
Mr	**FOUGHALI Taoufik**	*Rapporteur*	MCB	Béjaïa

Année Universitaire 2015/2016

Remerciements

Nous tenons tout d'abord à remercier Dieu Tout Puissant de nous avoir guidé et donné la force et la volonté pour atteindre notre objectif.

Nous remercions notre promoteur Mr. FOUGHALI Taoufik, pour sa disponibilité et ses précieux conseils et encouragements qui nous ont gardé sur le bon chemin affin de réaliser ce modeste travail.

Nous remercions également l'honorable jury pour avoir consenti à évaluer et juger notre travail.

On tient a exprimer nos plus sincères remerciements à tous les membres de la faculté des sciences exactes en général et aux membres du département de physique en particulier, ainsi que tous les enseignants pour les efforts fournis durant notre formation.

Nos sincéres remerciements vont à tous les étudiants de *master 2 en Physique Théorique*.

Nous tenons également à remercier toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin a la réalisation de ce modeste travail.

Dédicaces

Rien n'est aussi beau à offrir que le fruit d'un labeur qu'on dédie du fond du coeur à ceux qu'on aime et qu'on remercie en exprimant notre reconnaissance et notre profonde gratitude durant toute notre existence.

Je dédie ce modeste travail à :

Mon père le plus beau et bon de tous les pères

Ma plus belle étoile qui puisse exister dans l'univers ma" Chère mère"

Ma très chère grand-mère que Dieu la protège et la garde en bonne santé.

Mes chers frères : "Amar, Salah, Gano, Daib mazain dayaa, Nadjib"

Mes très chères sœurs : "Zina, Sofia, Mona, Hakima,"

Ma meilleur amie : "Youcaf Razika"

Mes nièces"Hanann, Mariam, Asia, Samra, Zina, Amria"

Ma grande famille : mes oncles et mes tantes, mes cousins et mes cousines.

Tous mes amis en particulier "Masouda, Kahina, Soumia, Salim, Berzak, Lamin,"

Tous les enseignants et les étudiants du département de physique en particulier notre promotion.

Table des matières

Introduction 2

1 L'équation de Dirac libre en coordonnées sphériques **5**

1.1 L'équation de Dirac libre en coordonnées cartésiennes 5

1.1.1 L'hamiltonien de Dirac libre 5

1.1.2 Solutions de l'équation de Dirac libre 6

1.2 Equation de Dirac du champ central 8

1.2.1 Hamiltonien du problème central 8

1.2.2 Solution de l'équation de Dirac libre 13

2 Une particule de Dirac dans un potentiel Coulombien **15**

2.1 Application à l'atome d'hydrogène 15

2.2 Détermination de l'énergie 18

2.3 Les niveaux d'énergie 21

3 Solution de l'équation de Dirac pour le potentiel de Woods-Saxon **23**

3.1 Nouvelle méthode de résolution 23

3.2 Solution du potentiel Woods-Saxon 28

Conclusion générale 36

Annexes 36

A Addition des moments cinétiques 37

B Spineurs sphériques 40

C Fonctions de Bessel sphériques 42

Introduction

La théorie de la relativité générale et la mécanique quantique sont indiscutablement les piliers de la physique de 20eme siècle. La mécanique quantique est la théorie physique consacrée à l'étude de la matière à l'échelle microscopique. Un aspect fondamental dans l'étude d'un système quantique est la résolution de l'équation de Schrödinger. A cet effet, dès l'avènement de la mécanique quantique, plusieurs méthodes ont été élaborées pour retrouver, de façon exacte, les solutions de cette équation ; c'est-à-dire, les spectres d'énergie des systèmes étudiés et ainsi que leurs fonctions d'ondes [1].

Quand on est intéressé par les faibles ampltitudes des états des atomes lourds, et en raison des grandes forces de Coulomb, la vitesse des électrons près du noyau se rapproche de la vitesse de la lumière. Dans ce cas, il devient nécessaire d'employer la formulation relativiste de Dirac de l'électron [2]. L'équation de Dirac est l'équation d'onde parfaite qui est capable de décrire les effets relativistes dues à la vitesse et au spin des particules. L'importance de l'équation de Dirac provient du fait qu'elle permet de décrire toutes les particules élémentaires connues de la matière, appelées leptons et quarks. En outre, la théorie de Dirac est à la base de l'électrodynamique quantique moderne, l'une des théories quantiques les plus précises à ce jour.

Ces dernières années, les chercheurs ont prêté une grande attention à la solution exacte de l'équation de Dirac avec differents types de potentiels. En fait, l'équation de Dirac n'a été exactement résolue que pour quelques interactions, en exigeant des contraintes fortes sur les potentiels étudiés. Cependant, les solutions exactes sont importantes pour mieux comprendre l'évolution des systèmes physiques, qui ne peut être connue qu'en analysant de telles solutions. Les problèmes exactement solubles peuvent être considérés comme un point de départ pour la construction de modèles plus réalistes et pour introduire des méthodes numériques pour résoudre les problèmes physiques les plus compliqués [3]-[7].

Dans ce mémoire, nous essayons de décrire des méthodes pour résoudre l'équation de Dirac dans le cas des potentiels radiaux. L'idée fondamentale consiste à décrire une particule dans une région plongée dans un potentiel à symétrie sphérique. L'équation de Dirac est séparée en deux parties, une partie radiale et une partie angulaire. La partie angulaire est la même pour tous les potentiels radiaux ; c'est un spineur harmonique sphérique [8]-[9]. Ainsi, le problème consiste à résoudre la partie radiale de l'équation de Dirac dans chaque cas étudié. Dans ce cadre, on va examiner deux cas importants. Le potentiel de Coulomb, qui joue un rôle important en mécanique quantique, notamment dans l'étude de l'atome d'hydrogène [8]-[10], ainsi que le potentiel de Woods-Saxon qui joue un rôle essentiel en physique microscopique, puisque il est utilisé pour décrire l'interaction entre les nucleons dans le noyau atomique [11]-[13]. Pour enrichir le travail on va utiliser deux approches différentes mais similaires. Dans les deux cas, on va calculer les niveaux d'énergie des états liés.

Ce mémoire est organisé comme suit :

Le premier chapitre est un rappel sur la théorie de Dirac, où on donne une solution de l'équation de Dirac pour la particule libre, en coordonnées sphériques.

Dans le deuxième chapitre, on étudie le cas d'une particule de spin $\frac{1}{2}$, soumise à un potentiel de Coulomb. Dans le cas stationnaire, une méthode de résolution, basée sur une séparation de variables, sera proposée pour l'équation d'onde. Ensuite, on établit l'expression des niveaux d'énergie des états liés et on donne les valeurs de l'énergie des premiers niveaux.

Le troisième chapitre est une application d'une nouvelle approche pour résoudre l'équation de Dirac avec le potentiel de Woods-Saxon. On va démontrer que le potentiel de Woods-Saxon peut être résolu pour des particules relativistes. On va établir, aussi, l'expression de l'énergie pour les niveaux d'énergie des états liés.

On termine le mémoire par une conclusion, dans laquelle on discute les résultats obtenus dans ce mémoire.

CHAPITRE 1

L'équation de Dirac libre en coordonnées sphériques

1.1 L'équation de Dirac libre en coordonnées cartésiennes

L'équation de Dirac est une équation relativiste à laquelle obéit la fonction d'onde des particules ayant un spin $\frac{1}{2}$, comme l'électron.

1.1.1 L'hamiltonien de Dirac libre

Soit $\Psi\left(x\right)$ un vecteur à 4 composantes, appelé bi-spineur de Dirac. L'équation de Dirac est donnée par :

$$\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - mc\right)\Psi\left(x\right) = 0 \tag{1.1.1}$$

qu'on peut mettre sous la forme

$$\left(\frac{i}{c}\gamma^{0}\partial_{t} + i\overrightarrow{\gamma}\cdot\overrightarrow{\nabla} - \frac{mc}{\hbar}\right)\Psi\left(x\right) = 0 \tag{1.1.2}$$

où $\partial_t \equiv \frac{\partial}{\partial t}$, $\nabla_i \equiv \frac{\partial}{\partial x^i}$ et $\gamma^\mu(\mu = 0,1,2,3)$ sont les matrices de Dirac. En multipliant l'équation (1.1.2) par γ^0, on obtient

$$i\left(\gamma^0\right)^2 \partial_t \Psi(x) = \left(-ic\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} + \frac{mc^2}{\hbar}\gamma^0\right)\Psi(x).$$

En posant $\gamma^0\vec{\gamma} = \vec{\alpha}$, $\beta = \gamma^0$ tout en sachant que $\left(\gamma^0\right)^2 = 1$, cette dernière équation devient

$$i\hbar\partial_t \Psi(x) = \left(-i\hbar c\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + mc^2\beta\right)\Psi(x) \tag{1.1.3}$$

Ainsi, l'équation (1.1.3) peut s'écrire :

$$i\hbar\partial_t \Psi(x) = H_D \Psi(x) \tag{1.1.4}$$

où $H_D = -i\hbar c\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + mc^2\beta$ est l'hamiltonnien de Dirac qui décrit une particule relativiste libre, $\vec{\alpha}$ et β sont des matrices hermitiques d'ordre 4. Dans la représentation standard, les matrices $\vec{\alpha}$ et β sont données par :

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Longrightarrow \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

où $\sigma_i(i = 1,2,3)$ sont les matrices de Pauli :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

1.1.2 Solutions de l'équation de Dirac libre

Cherchons une solutions de l'équation de Dirac pour une particule libre sous forme d'une onde plane, et posons :

$$\Psi(x) = u(p)e^{-\frac{i}{\hbar}px} \Leftrightarrow \Psi(\vec{x},t) = u(E,\vec{p})e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}.\vec{x})}, \tag{1.1.5}$$

où x et p sont, respectivement, les quadrivecteurs position et impulsion. L'injection de la solution (1.1.5) dans léquation de Dirac libre (1.1.1) implique, alors, une relation algébrique

$$(\gamma^{\mu}p_{\mu} - mc)u(p) = 0. \tag{1.1.6}$$

Nous allons maintenant séparer $u(p)$ en deux composantes, en écrivant

$$u(p) = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \tag{1.1.7}$$

où ϕ et χ sont deux spineurs de Weyl, i.e spineurs à deux composantes.

En utilisant la représentation standard de Dirac pour les matrices γ^{μ}, l'équation (1.1.6) prend la forme suivante

$$(\gamma^0 E - c\vec{\gamma} \cdot \vec{p})u(p) = \begin{pmatrix} E & -c\,\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ c\,\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = mc^2 \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \tag{1.1.8}$$

qui donne le système de deux équations

$$\begin{cases} E\phi - c\,\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\chi = mc^2\phi \\ -E\chi + c\,\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\phi = mc^2\chi \end{cases} \tag{1.1.9}$$

De la deuxième équation de (1.1.9) on obtient : $\chi = \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E+c^2m}\phi$.

Remarque :

En appliquant l'opérateur de la parité P_0 à chaqu'une des équations de (1.1.9), dans ce cas $\vec{x} \to -\vec{x}$ et $\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \to -\vec{\sigma}\cdot\vec{p}$, il est clair que le spineur ϕ doit avoir une parité opposée à celle du spineur χ.

En multipliant, maintenant, la première équation de (1.1.9) par $(E + c^2m)$ et en utilisant l'expression de χ en fonction de ϕ, on obtient :

$$\left[\left(E - c^2m\right)\left(E + c^2m\right) - c^2\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\right)^2\right]\phi = 0 \tag{1.1.10}$$

En utilisant l'identité $\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\right)^2 = \vec{p}\cdot\vec{p} = p^2$, l'équation (1.1.10) devient :

$$\left[E^2 - c^4m^2 - c^2p^2\right]\phi = 0 \quad \Longrightarrow \quad E^2 = c^4m^2 + c^2p^2 \tag{1.1.11}$$

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

$$E = \pm c\sqrt{m^2c^2 + p^2} = \pm cp_0 \tag{1.1.12}$$

Une solution d'énergie positive E^+ et une solution d'énergie négative E^-.

Pour : $E = E^+$, $\chi = \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{p_0+cm}\phi$

$$\Psi^+ = \begin{pmatrix} \phi \\ \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{p_0+cm}\phi \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}(cp_0t - \vec{p}.\vec{x})} \tag{1.1.13}$$

et pour : $E = E^-$,$\phi = -\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{p_0+cm}\chi$

$$\Psi^- = \begin{pmatrix} -\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{p_0+cm}\chi \\ \chi \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(cp_0t + \vec{p}.\vec{x})} \tag{1.1.14}$$

On appelle (1.1.13) la solution positive, et (1.1.14) la solution négative.

1.2 Equation de Dirac du champ central

Considérons une particule de masse m_0 en mouvement dans un potentiel central $V(r)$, qui ne dépend que de la distance r. La fonction d'onde Ψ décrivant un électron soumis au potentiel $V(r)$ satisfait l'équation

$$H\Psi = [h_0 + V(r)]\Psi = E\Psi, \tag{1.2.1}$$

où E est l'énergie de l'électron.

1.2.1 Hamiltonien du problème central

L'hamiltonien est donné par $H = h_0 + V(r)$, où $h_0 = c\vec{\alpha}.\vec{p} + m_0c^2\beta$ est l'hamiltonien libre de Dirac. Pour exprimer cet hamiltonien dans le système des coordonnées sphériques, il suffit de trouver l'expression du terme $\vec{\alpha}.\vec{p}$ dans ce système de coordonnées. Tout d'abord, on remarque que

$$\begin{aligned}\left(\vec{\alpha}\cdot\vec{r}\right)\left(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\right) &= \vec{r}\cdot\vec{p}+i\sigma\left(\vec{r}\times\vec{p}\right) \\ &= \vec{r}\cdot\vec{p}+i\vec{\sigma}\vec{L} \\ &= rp_r+i\left(\hbar+\vec{\sigma}\cdot\vec{L}\right)\end{aligned} \tag{1.2.2}$$

En effet, on a d'une part

$$\begin{aligned}\vec{r}\cdot\vec{p} &= -i\hbar(x\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+y\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r}+z\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}) \\ &= -i\hbar(x\frac{x}{r}\frac{\partial}{\partial r}+y\frac{y}{r}\frac{\partial}{\partial r}+z\frac{z}{r}\frac{\partial}{\partial r}) = -i\hbar(\frac{x^2+y^2+z^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}) \\ &= -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}\end{aligned}$$

et d'autre part, si nous définissons l'impulsion radiale par $p_r=\frac{1}{2}\left(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}+\vec{p}\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)$, nous obtenons

$$\begin{aligned}p_r &= \frac{1}{2}\left(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}+\vec{p}\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)=\frac{1}{2}\left(\frac{\vec{p}.\vec{r}}{r}+\vec{r}.\left(\vec{p}\frac{1}{r}\right)+2\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}\right) \\ &= -\frac{i\hbar}{2}\left(\frac{3}{r}-\frac{1}{r}+2\frac{\partial}{\partial r}\right)=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\end{aligned}$$

Il s'ensuit que

$$\vec{r}\cdot\vec{p}=rp_r+i\hbar$$

Définissons la vitesse radiale α_r par $\alpha_r=\vec{\alpha}\cdot\frac{\vec{r}}{r}\Rightarrow\frac{\alpha_r}{r}=\vec{\alpha}\cdot\frac{\vec{r}}{r^2}$. Ainsi, on aura : $\alpha_r^2=\left(\vec{\alpha}\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)\left(\vec{\alpha}\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)=\frac{r^2}{r^2}+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{r}\wedge\vec{r})=1$. En multipliant (1.2.2) à gauche par $\frac{\alpha_r}{r}$ on obtient

$$\begin{aligned}\vec{\alpha}\cdot\vec{p} &\equiv \left(\vec{\alpha}\cdot\frac{\vec{r}}{r^2}\right)(\vec{\alpha}\cdot\vec{r})(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})=\left(\vec{\alpha}\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)\left(\vec{\alpha}\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) \\ &= \frac{\alpha_r}{r}\left[rp_r+i\left(\hbar+\vec{\sigma}\cdot\vec{L}\right)\right] \\ \Rightarrow(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) &= \alpha_r p_r+i\frac{\alpha_r}{r}\left(\hbar+\vec{\sigma}\cdot\vec{L}\right)\end{aligned} \tag{1.2.3}$$

En utilisant le fait que le moment angulaire total $\overrightarrow{J} = \overrightarrow{L} + \frac{\hbar}{2}\overrightarrow{\sigma}$, ce qui implique que $\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\vec{\sigma}^2 + \hbar\overrightarrow{\sigma} \cdot \overrightarrow{L} = \vec{L}^2 + \frac{3\hbar^2}{4} + \hbar\overrightarrow{\sigma} \cdot \overrightarrow{L}$, de telle sorte à avoir le résultat suivant : $\hbar \cdot 1 + \overrightarrow{\sigma} \cdot \overrightarrow{L} = \frac{1}{\hbar}\left[\vec{J}^2 - \vec{L}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right]$. Ainsi, l'hamiltoien (1.2.1) s'écrit dans le système des coordonnées sphériques

$$\begin{aligned} H &= c\overrightarrow{\alpha} \cdot \overrightarrow{p} + \beta mc^2 + V(r) \\ &= c\left[\alpha_r p_r + i\frac{\alpha_r}{r}(\hbar + \overrightarrow{\sigma} \cdot \overrightarrow{L})\right] + \beta m_0 c^2 + V(r) \\ &= c\alpha_r p_r + i\frac{c\alpha_r}{r}\frac{1}{\hbar}\left[\vec{J}^2 - \vec{L}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right] + \beta m_0 c^2 + V(r) \end{aligned} \tag{1.2.4}$$

La séparation des variables

L'hamiltonien H commute à la fois avec l'opérateur de la parité P , le carré de l'opérateur du moment angulaire J^2 et la troixième composante J_z de $\vec{J}$. Donc la fonction d'onde Ψ doit être une fonction propre de P, J^2 et J_z avec les valeurs propres $(-1)^{j+\frac{\eta}{2}}$, $j(j+1)\hbar^2$ et $m\hbar$ repectivement (pour plus de détails sur les valeurs propres de l'opérateur de la parité voir Annexe B) :

$$J^2\Psi = j(j+1)h^2\Psi,\ J_z\Psi = m\hbar\Psi\ , P\Psi = (-1)^{j+\frac{\eta}{2}}\,\Psi.$$

où

$$\eta = \begin{cases} +1 & \text{si la parité est } (-1)^{j+\frac{1}{2}}, \\ -1 & \text{si la parité est } (-1)^{j-\frac{1}{2}}, \end{cases}$$

Mettons Ψ sous la forme

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \tag{1.2.5}$$

où ϕ et χ sont deux spineurs à déterminer.

Sachant que les seules valeurs pour l sont $l = j \pm \frac{1}{2}$ et que φ et χ ont deux parités opposées, nous pouvons prendre l'ansatz suivant pour la solution de l'équation de Dirac avec moment cinétique j, nombre magnétique m et parité $(-1)^{j+\frac{\eta}{2}}$:

$$\Psi_{jlm} = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} F(r)\Omega_{jlm} \\ iG(r)\Omega_{jl'm} \end{pmatrix}, \text{ avec } l = j + \frac{\eta}{2} \text{ et } l' = j - \frac{\eta}{2}. \tag{1.2.6}$$

les Ω_{jlm} sont les spineurs harmoniques sphériques, composés par les harmoniques sphériques ordinaires $Y_{lm'}$ est les spineurs de base $\chi(s_3)$

$$\Omega_{jlm} = \sum_{m'm} \left(l\frac{1}{2}j \mid m'm_s m \right) Y_{lm'}\chi_{\frac{1}{2}m_s} \tag{1.2.7}$$

où $\left(l\frac{1}{2}j \mid m'm_s m\right)$ sont les coefficients de Clebsh-Gordon et $\chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = \binom{0}{1}$, $\chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \binom{0}{1}$. Les Ω_{jlm} ont la même parité que Y_{lm} , $(-1)^l$ (Voir Annexe A et B).

Il nous reste à déterminer les fonctions radiales $G(r)$ et $F(r)$. En appliquant l'opérateur $\frac{1}{\hbar}\left[\vec{J}^2 - \vec{L}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right]$ sur ϕ, nous obtenons

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar}\left[\vec{J}^2 - \vec{L}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right]\phi &= \left[j(j+1)\hbar^2 - l(l+1)\hbar^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right]\phi \\ &= \frac{1}{\hbar}\left[j(j+1)\hbar^2 - (j+\frac{\eta}{2})(j+1+\frac{\eta}{2})\hbar^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right]\phi \\ &= -(2j+1)\frac{\eta}{2}\hbar\phi.\end{aligned} \tag{1.2.8}$$

De la même manière, en appliquant $\frac{1}{\hbar}\left[\vec{J}^2 - \vec{L}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right]$ sur χ, on obtient

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar}\left[\vec{J}^2 - \vec{L}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right]\chi &= \left[j(j+1)\hbar^2 - l'(l'+1)\hbar^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right]\chi \\ &= \frac{1}{\hbar}\left[j(j+1)\hbar^2 - (j-\frac{\eta}{2})(j+1-\frac{\eta}{2})\hbar^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right]\chi \\ &= (2j+1)\frac{\eta}{2}\hbar\chi.\end{aligned} \tag{1.2.9}$$

Nous pouvons condenser ces deux résultats sous la forme

$$\frac{1}{\hbar}\left[\vec{J}^2 - \vec{L}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right]\Psi^\eta_{jm} = -\frac{\eta}{2}(2j+1)\hbar\beta\Psi^\eta_{jm}. \tag{1.2.10}$$

où $\Psi^\eta_{jm} \equiv \Psi_{jlm}$. Ainsi, l'équation (1.2.1) se réduit à

$$\begin{aligned}
H\Psi^{\eta}_{jm} &= \left[c\alpha_r p_r + i\frac{c\alpha_r}{r}\frac{1}{\hbar}\left[\vec{J}^2 - \vec{L}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right] + \beta m_0 c^2 + V(r)\right]\Psi^{\eta}_{jm} \\
&= \left[c\alpha_r p_r + ic\frac{\alpha_r}{r}\left(-\frac{\eta}{2}\hbar\beta\,(2j+1)\right) + \beta m_0 c^2 + V(r)\right]\Psi^{\eta}_{jm} \\
&= \left[-i\hbar\frac{c}{r}\alpha_r\frac{\partial}{\partial r}r - i\frac{c}{r}\alpha_r\hbar\eta\beta\left(j+\frac{1}{2}\right) + \beta m_0 c^2 + V(r)\right]\Psi^{\eta}_{jm} \\
&= \left[-i\hbar\frac{c}{r}\alpha_r\left[\frac{\partial}{\partial r}r + \eta\beta\left(j+\frac{1}{2}\right)\right] + \beta m_0 c^2 + V(r)\right]\Psi^{\eta}_{jm} = E\Psi^{\eta}_{jm}
\end{aligned}$$

Par définition on a : $\overrightarrow{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \overrightarrow{\sigma} \\ \overrightarrow{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$, $\alpha_r = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_r \\ \sigma_r & 0 \end{pmatrix}$, $\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ et $\alpha_r\beta = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_r \\ \sigma_r & 0 \end{pmatrix}$ où $\sigma_r = \overrightarrow{\sigma}\cdot\frac{\overrightarrow{r}}{r}$.

En utilisant l'ansatz (1.2.6) pour Ψ^{η}_{jm}, on obtient finalement le système suivant

$$\begin{cases} -i\hbar\frac{c}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}r - \eta(j+\frac{1}{2})\right]\frac{G(r)}{r}(\vec{\sigma}\cdot\frac{\vec{r}}{r})i\Omega_{jl'm} + \left(m_0c^2 + V(r) - E\right)\frac{F(r)}{r}\Omega_{jlm} = 0 \\ -i\hbar\frac{c}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}r + \eta(j+\frac{1}{2})\right]\frac{F(r)}{r}(\vec{\sigma}\cdot\frac{\vec{r}}{r})\Omega_{jlm} + \left(-m_0c^2 + V(r) - E\right)i\frac{G(r)}{r}\Omega_{jl'm} = 0 \end{cases} \tag{1.2.11}$$

A présent, nous avons l'identité suivante (pour la démonstration de cette identité voir [8])

$$(\vec{\sigma}\cdot\frac{\vec{r}}{r})\Omega_{jlm} = -\Omega_{jl'm}, \quad \text{de même} \quad (\vec{\sigma}\cdot\frac{\vec{r}}{r})\Omega_{jl'm} = -\Omega_{jlm}. \tag{1.2.12}$$

En utilisant cette identité, on obtient alors un système d'équations différentielles couplées du premier ordre :

$$\begin{cases} -\left[\frac{dG(r)}{dr} - \eta(j+\frac{1}{2})\frac{G(r)}{r}\right] = \left[\frac{(E-m_0c^2-V(r))}{\hbar c}\right]F(r) \\ \left[\frac{dF(r)}{dr} + \eta(j+\frac{1}{2})\frac{F(r)}{r}\right] = \left[\frac{(E+m_0c^2-V(r))}{\hbar c}\right]G(r). \end{cases} \tag{1.2.13}$$

ou encore

$$\begin{cases} \left[\frac{d}{dr} - \frac{\eta(j+\frac{1}{2})}{r}\right]G(r) = \left[\frac{mc^2+V(r)-E}{\hbar c}\right]F(r) \\ \left[\frac{d}{dr} + \frac{\eta(j+\frac{1}{2})}{r}\right]F(r) = \left[\frac{E+mc^2-V(r)}{\hbar c}\right]G(r). \end{cases} \tag{1.2.14}$$

1.2.2 Solution de l'équation de Dirac libre

Dans le cas libre $V(r) = 0$, le système (1.2.14) se réduit à

$$\begin{cases} \left[-\frac{d}{dr} + \frac{\eta(j+\frac{1}{2})}{r}\right] G(r) = \frac{E-m_0c^2}{\hbar c} F(r) \\ \left[\frac{d}{dr} + \frac{\eta(j+\frac{1}{2})}{r}\right] F(r) = \frac{E+m_0c^2}{\hbar c} G(r). \end{cases} \tag{1.2.15}$$

Dans ce cas, on tire de la deuxième équation de (1.2.15) la relation suivante

$$G(r) = \frac{\hbar c}{E + m_0c^2}\left[\frac{d}{dr} + \frac{\eta(j+\frac{1}{2})}{r}\right] F(r), \tag{1.2.16}$$

En remplaçant $G(r)$, donnée par (1.2.16), dans la première équation de (1.2.15), on obtient l'équation différentielle pour la fonction $F(r)$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\left(j+\frac{1}{2}\right)\left(j+\frac{1}{2}+\eta\right)}{r^2} + \frac{E^2 - m_0^2c^4}{(\hbar c)^2}\right] F_l(r) = 0. \tag{1.2.17}$$

Prenons en compte que $l = j + \frac{\eta}{2} \Longrightarrow \left(j+\frac{1}{2}\right)\left(j+\frac{1}{2}+\eta\right) = l(l+1)$, et posons $\frac{E^2-m_0^2c^4}{(\hbar c)^2} = k^2$, l'équation (1.2.17) prend la forme suivante :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] F_l(r) = 0 \tag{1.2.18}$$

En faisant le changement de variable $\rho = kr$ et le changement des fonctions $F_l(r) = \rho\hat{F}_l(\rho)$, $G(r) = \rho\hat{G}_l(\rho)$, les deux équations (1.2.16) et (1.2.18) donnent le système d'équations suivant [8] :

$$\begin{cases} \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1\right] \hat{F}_l(\rho) = 0 \\ \hat{G}_{l'}(\rho) = \frac{\hbar c k}{E + m_0c^2}\left[\frac{d}{d\rho} + \frac{\eta(j+\frac{1}{2})}{\rho}\right] \hat{F}_l(\rho), \end{cases} \tag{1.2.19}$$

où $l' = 2j - l$. La solution de la première équation est donnée par les fonctions de Bessel sphériques $j_l, n_l, h_l^{\pm}$ (voir Annexe C). Les formules de récurence pour les fonctions de

Bessel sphériques [14] :

$$\hat{F}_{l-1}(\rho) = \frac{d}{d\rho}\hat{F}_l(\rho) + \frac{l+1}{\rho}\hat{F}_l(\rho) \quad , \quad \hat{F}_{l+1}(\rho) = -\frac{d}{d\rho}\hat{F}_l(\rho) + \frac{l}{\rho}\hat{F}_l(\rho),$$

permèttent d'obtenir la solution suivante pour G_l :

$$\hat{G}_{l'}(\rho) = \frac{\hbar c k \eta}{E + m_0 c^2}\hat{F}_{l'}(\rho), \text{ où } l' = 2j - l \tag{1.2.20}$$

La solution bornée partout acceptée physiquement, pour $|E| > mc^2$, est donnée par la fonction de Bessel sphérique $\hat{F}_l(\rho) = j_l(\rho)$. Ainsi, La solution physique du système d'équations couplées (1.2.14) est donnée par

$$\begin{aligned} F_l(r) &= A_l\, r j_l(kr), \quad k = \sqrt{\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{\hbar^2 c^2}} \\ G_{l'}(r) &= A_l\, \frac{c\hbar k \eta}{E + m_0 c^2} r j_{l'}(kr) \end{aligned} \tag{1.2.21}$$

où A_l est une constante de normalisation. Ainsi, pour chaque valeur de l'énergie $|E| > mc^2$, on obtient une onde sphérique libre avec moment angulaire total j et parité $(-1)^{j+\eta/2}$ [8].

CHAPITRE 2

Une particule de Dirac dans un potentiel Coulombien

2.1 Application à l'atome d'hydrogène

Comme exemple d'application des méthodes développées dans le chapitre précédent, nous allons étudier le cas d'une particule de spin 1/2 dans un potentiel de Coulomb de la forme (atome hydrogène) [8]

$$V(r) = -\frac{Z\hbar c\alpha}{r}, \tag{2.1.1}$$

où Z est le nombre atomique (dans le cas de l'atome d'hydrogéné $Z = 1$) et α est la constante de la structure fine, $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137.03602$. Dans la limite des grandes valeurs de r, $r \to \infty$, les équations de Dirac radiales (1.2.14) deviennent

$$\begin{cases} -\dfrac{dG}{dr} = \dfrac{E - m_0c^2}{c\hbar}F, \\ \dfrac{dF}{dr} = \dfrac{E + m_0c^2}{c\hbar}G, \end{cases} \tag{2.1.2}$$

où on a éliminé les indices l et l'. La combinaison de ces deux équations donne la relation

$$\frac{d^2F}{dr^2} = -\frac{E^2 - m_0^2c^4}{c^2\hbar^2}F. \tag{2.1.3}$$

La solution normalisable et décroissante à l'infini, est donnée par :

$$F(r \to \infty) \sim e^{-kr}, \text{ avec } k = \sqrt{\frac{m_0^2c^4 - E^2}{c^2\hbar^2}} \tag{2.1.4}$$

Dans le cas $r \to 0$, le système (1.2.14) se réduit à

$$\begin{cases} \left[-\frac{d}{dr} + \frac{\eta(j+1/2)}{r}\right] G = \frac{Z\alpha}{r}F, \\ \left[\frac{d}{dr} + \frac{\eta(j+1/2)}{r}\right] F = \frac{Z\alpha}{r}G, \end{cases} \tag{2.1.5}$$

dont les équations peuvent à leurs tour être combinées pour donnerl'équation différentielle d'ordre 2

$$\left\{r\frac{d^2}{dr^2} + \frac{d}{dr} + \frac{1}{r}\left[(Z\alpha)^2 - \left(j + \frac{1}{2}\right)^2\right]\right\} F = 0. \tag{2.1.6}$$

La solution régulière de cette dernière équation est donnée par

$$F(r \to 0) \sim r^s, \text{ où } s = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}. \tag{2.1.7}$$

Afin de faciliter les calculs suivants, nous introduisons les substitutions

$$\begin{cases} \rho = kr,\ F(r) = \hat{F}(\rho),\ G(r) = \hat{G}(\rho),\ k = \sqrt{\frac{m_0^2c^4 - E^2}{c^2\hbar^2}} \\ \tau = \eta\left(j + \frac{1}{2}\right),\ \nu = \sqrt{\frac{m_0c^2 - E}{m_0c^2 + E}},\ \alpha Z = \gamma \end{cases} \tag{2.1.8}$$

de sorte que les équations radiales d'origine (1.2.14) deviennent

$$\begin{cases} \left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{\tau}{\rho}\right)\hat{G} = \left(-\nu + \frac{\gamma}{\rho}\right)\hat{F}, \\ \left(\frac{d}{d\rho} + \frac{\tau}{\rho}\right)\hat{F} = \left(\frac{1}{\nu} + \frac{\gamma}{\rho}\right)\hat{G}. \end{cases} \tag{2.1.9}$$

Proposons des solutions sous forme de séries de type Frobinius [8]

$$\left\{\begin{array}{l}\hat{F}=\sum_{n=0}^{N}a_{n}\rho^{n+s}e^{-\rho},\\ \hat{G}=\sum_{n=0}^{N}b_{n}\rho^{n+s}e^{-\rho}.\end{array}\right. \tag{2.1.10}$$

Pour pouvoir exploiter les solutions précédentes dans les équations (2.1.9), nous calculons d'abord les dérivées premiéres. Elles sont données par les expressions suivantes :

$$\left\{\begin{array}{l}\dfrac{d\hat{F}}{d\rho}=\sum_{n=0}^{N}a_{n}\left[\left(n+s\right)\rho^{n+s-1}-\rho^{n+s}\right]e^{-\rho},\\ \dfrac{d\hat{G}}{d\rho}=\sum_{n=0}^{N}b_{n}\left[\left(n+s\right)\rho^{n+s-1}-\rho^{n+s}\right]e^{-\rho}.\end{array}\right. \tag{2.1.11}$$

En tenant compte de (2.1.10) et (2.1.11) ,alors l'équation différentielle (2.1.9) s'écrit sous la forme atgébrique suivante,

$$\left\{\begin{array}{l}\sum_{n=0}^{N}\rho^{n+s-1}\left[b_{n}\left[(n+s)-\tau\right]+\gamma a_{n}\right]-\sum_{n=0}^{N}\rho^{n+s}\left[b_{n}-a_{n}\nu\right]=0,\\ \sum_{n=0}^{N}\rho^{n+s-1}\left[a_{n}\left[(n+s)+\tau\right]-\gamma b_{n}\right]-\sum_{n=0}^{N}\rho^{n+s}\left[a_{n}+\dfrac{1}{\nu}b_{n}\right]=0.\end{array}\right. \tag{2.1.12}$$

Pour pouvoir "connecter" les deux séries $\sum_{n=0}^{N}\rho^{n+s-1}(...)$ et $\sum_{n=0}^{N}\rho^{n+s}(...)$, qui figurent dans les deux équations de (2.1.12), effectuons le changement d'indices qui suit :

$$\left\{\begin{array}{c}n=n'-1\Longrightarrow n'=n+1,\\ \rho^{n+s}=\rho^{n'+s-1},\\ n:0\rightarrow N\Longrightarrow n':1\rightarrow N+1.\end{array}\right. \tag{2.1.13}$$

On obtient, ainsi, le système suivant :

$$\begin{array}{l}\rho^{s-1}\left[b_{0}\left[s-\tau\right]+\gamma a_{0}\right]-\rho^{N+s}\left[b_{N}-\nu a_{N}\right]+\sum_{n=0}^{N}\rho^{n+s-1}\left[b_{n}\left[(n+s)-\tau\right]+\gamma a_{n}-b_{n-1}+\nu a_{n-1}\right]=0,\\ \rho^{s-1}\left[a_{0}\left[s+\tau\right]-\gamma b_{0}\right]-\rho^{N+s}\left[a_{N}+\dfrac{1}{\nu}b_{N}\right]+\sum_{n=0}^{N}\rho^{n+s-1}\left[a_{n}\left[(n+s)+\tau\right]-\gamma b_{n}-a_{n-1}+\dfrac{1}{\nu}b_{n-1}\right]=0,\end{array}.$$

qui permet d'obtenir les relations :

$$b_0\left[s-\tau\right]+\gamma a_0=0,\ a_0\left[s+\tau\right]-\gamma b_0=0,\ b_N-\nu a_N=0,\ a_N+\frac{1}{\nu}b_N=0, \tag{2.1.14}$$

en plus des relations de récurrences suivantes :

$$\begin{cases} b_n\left[(n+s)-\tau\right]+\gamma a_n-b_{n-1}+\nu a_{n-1}=0, \\ a_n\left[(n+s)+\tau\right]-\gamma b_n-a_{n-1}+\frac{1}{\nu}b_{n-1}=0, \end{cases} \quad \text{tel que } n=1,...N. \tag{2.1.15}$$

2.2 Détermination de l'énergie

Réécrivons les relations de récurrences (2.1.15) sous la forme d'un système d'équations linéaires,

$$\begin{pmatrix} [(n+s)+\tau] & -\gamma \\ \gamma & (n+s)-\tau \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a_{n-1}-\frac{1}{\nu}b_{n-1} \\ b_{n-1}-\nu a_{n-1} \end{pmatrix} \tag{2.2.1}$$

La condition d'existence d'une solution unique pour un tel systéme d'équations est que le déterminant soit non nul (condition d'inversion d'une matrice) :

$$\begin{aligned} \Delta &= \begin{vmatrix} [(n+s)+\tau] & -\gamma \\ \gamma & (n+s)-\tau \end{vmatrix} \\ &= \left[(n+s)+\tau\right]\left[(n+s)-\tau\right]+\gamma^2 \\ &= (n+s)^2-\tau^2+\gamma^2. \end{aligned}$$

On obtient la contrainte suivante sur les valeurs de Δ :

$$\Delta=n(n+2s)\neq 0 \tag{2.2.2}$$

Dans le cas où la condition (2.2.2) est vérifiée, la solution du système linéaire (2.2.1) s'écrit comme suit :

$$\begin{cases} a_n = \frac{1}{n(n+2s)} \left\{ (n+s-\tau-\gamma\nu)\, a_{n-1} + \left(\gamma - \frac{1}{\nu}(n+s-\tau)\right) b_{n-1} \right\}, \\ b_n = \frac{1}{n(n+2s)} \left\{ -\left(\gamma + (n+s+\tau)\,\nu\right) a_{n-1} + \left(\frac{\gamma}{\nu} + (n+s+\tau)\right) b_{n-1} \right\}. \end{cases} \tag{2.2.3}$$

La prochaine étape consiste à vérifier la troixième et la quatrième condition de (2.1.14) par les relations de récurrence (2.2.3), pour $n = N$. Pour ce faire,

$$b_N = \nu a_N = \left(\frac{(N+s-\tau)\,\nu}{N(N+2s)} - \frac{\gamma\nu^2}{N(N+2s)} \right) a_{N-1} + \left(\frac{\nu\gamma}{N(N+2s)} - \frac{(N+s-\tau)}{N(N+2s)} \right) b_{N-1} \tag{2.2.4}$$

L'identification membre à mombre de (2.2.4) et de (2.2.3), quand $n = N$, nous conduit aux deux éqution suivantes :

$$\left((N+s-\tau)\,\nu - \gamma\nu^2\right) = -[\gamma + (N+s+\tau)\,\nu] \tag{2.2.5}$$

$$\left(\nu\gamma - (N+s-\tau)\right) = \left(\frac{\gamma}{\nu} + (N+s+\tau)\right) \tag{2.2.6}$$

Ces deux équation sont identique. Donc pour déterminer les énergies E_N, on utilise l'une de ces deux équations. L'équation (2.2.6) nous permet d'écrire :

$$\begin{aligned} (N+s-\tau) + (N+s+\tau) &= \nu\gamma - \frac{\gamma}{\nu} \\ 2\,(N+s) &= \gamma\left(\nu - \frac{1}{\nu}\right) \\ &= \gamma\left(\frac{\frac{m_0c^2-E}{m_0c^2+E} + 1}{\sqrt{\frac{m_0c^2-E}{m_0c^2+E}}} \right) \end{aligned}$$

donc

$$(N+s) = -\gamma\sqrt{\frac{E^2}{\left(m_0c^2\right)^2 - E^2}}$$

En élevant au carré les deux membres

$$(N+s)^2 = \gamma^2\frac{E^2}{\left(m_0c^2\right)^2 - E^2}$$

il est possible d'isoler le terme d'énergie. En effet,

$$(N+s)^2\left(m_0c^2\right)^2=E^2\left((N+s)^2+\gamma^2\right)$$

$$\begin{aligned}E^2&=\left(m_0c^2\right)^2\frac{(N+s)^2}{(N+s)^2+\gamma^2}\\&=\left(m_0c^2\right)^2\left(1+\frac{\gamma^2}{(N+s)^2}\right)^{-1}.\end{aligned}$$

Ainsi, les niveaux d'énergie E_N sont donnés par l'expression

$$E=m_0c^2\left(1+\frac{\gamma^2}{(N+s)^2}\right)^{-1/2}. \tag{2.2.7}$$

En remplaçant s par sa valeur dans (2.1.7), les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogéne s'écrivent finalement :

$$E_N=mc^2\left(1+\frac{\gamma^2}{\left(N+\sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-\gamma^2}\right)^2}\right)^{-1/2}. \tag{2.2.8}$$

En développant l'expression (2.2.8) en puissance de γ^2 ,$\gamma=\frac{1}{137{,}036}\ll 1$, on obtient

$$E=m_0c^2\left[1-\frac{\gamma^2}{2(s+N)^2}+\frac{3}{8}\frac{\gamma^4}{(s+N)^4}+.....\right]$$

et

$$s=\sqrt{(j+\frac{1}{2})^2-\gamma^2}\simeq(j+\frac{1}{2})\left[1-\frac{\gamma^2}{2(j+\frac{1}{2})^2}+.....\right]$$

en trouve finalement :

$$E_N=m_0c^2\left[1-\frac{\gamma^2}{2(N+j+\frac{1}{2}-\frac{\gamma^2}{2j+1})^2}+\frac{3}{8}\frac{\gamma^4}{(N+j+\frac{1}{2})^4}+......\right] \tag{2.2.9}$$

Posons $N' = N + j + \frac{1}{2}$, l'équation (2.2.9) devient

$$E_{N'} = m_0c^2 \left[1 - \frac{\gamma^2}{2(N' - \frac{\gamma^2}{2j+1})^2} + \frac{3}{8}\frac{\gamma^4}{N'^4} + ... \right]. \tag{2.2.10}$$

En écrivant le dénominateur du second nombre comme

$$(N' - \frac{\gamma^2}{2j+1})^2 \simeq N'^2 - \frac{2N'\gamma^2}{2j+1} + ... = N'^2 \left[1 - \frac{\gamma^2}{N'(j+\frac{1}{2})} \right]$$

et en négligeant les termes d'ordres supérieurs, l'expression (2.2.10) devient

$$E_{N'} = m_0c^2 \left[1 - \frac{\gamma^2}{2N'^2}(1 + \frac{\gamma^2}{N'(j+\frac{1}{2})}) + \frac{3}{8}\frac{\gamma^4}{N'^4} + ... \right] \tag{2.2.11}$$

$$= m_0c^2 \left[1 - \frac{\gamma^2}{2N'^2} - \frac{\gamma^4}{2N'^4}(\frac{N'}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}) + ... \right]. \tag{2.2.12}$$

2.3 Les niveaux d'énergie

Le premier terme dans (2.2.12) est le terme de l'énergie au repos, $E = m_0c^2$. Le second est conforme à la quantité prédite par la théorie de la mécanique quantique non relativiste. Le terme de Bohr $T_2 = -\frac{mc^2\gamma^2}{2N'^2}$ peut être obtenu à partir des quantités $\gamma = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}$ et $Rhc = \frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}$. En effet,

$$\begin{aligned} -\frac{mc^2\gamma^2}{2N'^2} &= -\frac{Z^2e^4}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2c^2} \cdot \frac{mc^2}{2N'^2} \\ &= -\frac{Z^2me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{N'^2} \\ &= -\frac{Z^2Rhc}{N'^2}. \end{aligned}$$

Tous les termes qui suivent sont des corrections relativistes. Leur effet est de faire lever la dégénérescence non relativiste de tous les niveaux avec le même N. En fixant N, l'énergie de chaque niveau est légèrement relevée en fonction de j.

Pour une distinction plus facile entre les différents niveaux d'énergie, on adopte la notation spectroscopique non relativiste Nl_j, où la valeur l est renvoyée aux deux composantes supérieures du spineur de Dirac, c'est à dire $l = j + 1/2$. Le tableau (A) donne les premiers niveaux d'énergies de l'électron dans l'atome d'hydrogène [8].

N	N'	J	η	Nl_j	*Énergie E*
1	0	$\frac{1}{2}$	-1	$1s_{1/2}$	$\sqrt{1-(Z\alpha)^2}$
2	1	$\frac{1}{2}$	-1	$2s_{1/2}$	$\sqrt{\frac{1+\sqrt{1-(Z\alpha)^2}}{2}}$
2	1	$\frac{1}{2}$	$+1$	$2s_{1/2}$	$\sqrt{\frac{1+\sqrt{1-(Z\alpha)^2}}{2}}$
2	0	$\frac{3}{2}$	-1	$2s_{3/2}$	$\frac{\sqrt{4+(Z\alpha)^2}}{2}$
3	2	$\frac{1}{2}$	$+1$	$3s_{1/2}$	$\frac{2+\sqrt{1-(Z\alpha)^2}}{\sqrt{5+4\sqrt{1-(Z\alpha)^2}}}$
3	2	$\frac{1}{2}$	$+1$	$3s_{1/2}$	$\frac{2+\sqrt{1-(Z\alpha)^2}}{\sqrt{5+4\sqrt{1-(Z\alpha)^2}}}$
3	1	$\frac{3}{2}$	-1	$3s_{3/2}$	$\frac{1+\sqrt{4-(Z\alpha)^2}}{\sqrt{5+4\sqrt{4-(Z\alpha)^2}}}$
3	1	$\frac{3}{2}$	$+1$	$3s_{3/2}$	$\frac{1+\sqrt{4-(Z\alpha)^2}}{\sqrt{5+4\sqrt{4-(Z\alpha)^2}}}$
3	0	$\frac{5}{2}$	-1	$3s_{5/2}$	$\frac{\sqrt{9-(Z\alpha)^2}}{3}$

Tab (A).Énergies des niveaux d'atome d'hydrogène.

CHAPITRE 3

Solution de l'équation de Dirac pour le potentiel de Woods-Saxon

3.1 Nouvelle méthode de résolution

La fonction d'onde d'une particule libre satisfait à l'équation de Dirac, qu'on peut écrire, dans le système d'unités atomiques et relativistes où $\hbar = m = 1$ comme [3]-[5] :

$$(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - \lambda^{-1})\psi = 0, \tag{3.1.1}$$

où λ est la longueur d'onde réduite de Compton $\lambda = \dfrac{\hbar}{m\,c}$, m est la masse de la particule et c est la vitesse de la lumière.

Couplons la particule de Dirac au quadri-potentiel $A_{\mu}\left(A_0, \vec{A}\right)$. Le couplage minimal invariant de jauge est satisfait par la substitution $\partial_{\mu} \longrightarrow \partial_{\mu} + i\lambda A_{\mu}$. On obtient, donc, l'équation Dirac avec un terme d'interaction avec le potentiel A_{μ}

$$\left[i\gamma^{\mu}\left(\partial_{\mu} + i\lambda A_{\mu}\right) - \lambda^{-1}\right]\psi = 0. \tag{3.1.2}$$

En développant l'équation (3.1.2), on trouve

$$\left[i\gamma^\mu \partial_\mu - \lambda\gamma^\mu A_\mu - \lambda^{-1}\right]\psi = \left[i\lambda\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\vec{\gamma}\cdot\vec{\nabla} - \lambda\gamma^\mu A_\mu - \lambda^{-1}\right]\psi = 0. \qquad (3.1.3)$$

Il s'ensuit que

$$i\lambda\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[-i\vec{\gamma}\cdot\vec{\nabla} + \lambda\gamma^\mu A_\mu + \lambda^{-1}\right]\psi.$$

En multipliantà gauche cette dernière équation par γ^0/λ, on obtient

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[-i\lambda^{-1}\gamma^0\vec{\gamma}\cdot\vec{\nabla} + \gamma^0\vec{\gamma}\vec{A} + A_0 + \gamma^0\lambda^{-2}\right]\psi.$$

par définition $\gamma^0\vec{\gamma} = \vec{\alpha}$ et $\gamma^0 = \beta$. Ainsi,

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[-i\lambda^{-1}\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + \vec{\alpha}\cdot\vec{A} + A_0 + \lambda^{-2}\beta\right]\psi = H\psi. \qquad (3.1.4)$$

Donc, l'hamiltonien est donné par

$$H = \begin{pmatrix} \lambda A_0 + 1 & -i\lambda\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} + \lambda\vec{\sigma}\cdot\vec{A} \\ -i\lambda\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla} + \lambda\vec{\sigma}\cdot\vec{A} & \lambda A_0 - 1 \end{pmatrix}.$$

Prenons le cas où le potentiel à une symétrie sphérique, de telle sorte que $A_\mu = \left(A_0, \vec{A}\right) = \left(V(r), \frac{1}{\lambda}\hat{r}W(r)\right)$, où $\hat{r}$ est le vecteur unitaire radiale et r est le module du vecteur position radial, $\vec{r} = r\hat{r}$. $V(r)$ et $W(r)$ sont deux fonctions réelles radiales. Ainsi, nous pouvons mettre ψ sous la forme [9] :

$$\psi = \begin{pmatrix} i\,[g(r)/r]\,\Omega_{jlm} \\ (f(r)/r)\,\vec{\sigma}\cdot\hat{r}\Omega_{jl'm} \end{pmatrix} e^{-i\varepsilon t}$$

où $f(r)$ et $g(r)$ sont des fonctions réeles de carrés intégrables et ε est la valeur propre de l'hamiltonien H, autrement dit, c'est l'énergie de la particule. La composante angulaire Ω_{jlm} du spineurs ψ est le spineur harmonique sphérique (1.2.7), qui est donné explicitement par la relation suivante

$$\Omega_{jlm} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l \pm m + 1/2} Y_l^{m-1/2}(\theta,\phi) \\ \pm\sqrt{l \mp m + 1/2} Y_l^{m+1/2}(\theta,\phi) \end{pmatrix}, \quad \text{pour} \quad j = l \pm \frac{1}{2},$$

où $Y_l^{m\pm 1/2}$ est la fonction harmonique sphérique et $-j \leq m \leq j$ est le nombre quantique magnétique.

Définissons, maintenant, un nouveaux opérateur $\hat{K}$ telle que

$$\hat{K}^2 = \hat{J}^2 + \frac{\hbar^2}{4}, \tag{3.1.5}$$

avec les valeurs propres

$$\hat{K}^2\psi = \left(\hat{J}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right)\psi = \left(\hbar^2 j(j+1) + \frac{\hbar^2}{4}\right)\psi = \hbar^2\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 \psi. \tag{3.1.6}$$

Il s'ensuit que

$$\hat{K}\psi = \pm\hbar\left(j + \frac{1}{2}\right)\psi = -\hbar\kappa\psi. \tag{3.1.7}$$

où κ est un nouveau nombre quantique relié à l par

$$\kappa = \mp\hbar\left(j + \frac{1}{2}\right) = \begin{cases} -(l+1), \text{ pour } j = l + \frac{1}{2} \\ l, \qquad\quad \text{pour } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \tag{3.1.8}$$

Nous pouvons donner une expression de $\hat{K}$, en remarquant que

$$\begin{aligned} \hat{K}^2 = \hat{J}^2 + \frac{\hbar^2}{4} &= \left(\hat{L} + \frac{\hbar\vec{\sigma}}{2}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{4} \\ &= L^2 + \hbar\hat{L}\cdot\vec{\sigma} + \hbar^2 \\ &= \left(\vec{\sigma}\cdot\hat{L}\right)^2 + 2\hbar\hat{L}\cdot\vec{\sigma} + \hbar^2 \\ &= \left(\hat{L}\cdot\vec{\sigma} + \hbar\right)^2. \end{aligned}$$

où on a utilisé le fait que les composantes de $\hat{L}$ ne commutent pas, ce qui donne

$$\left(\vec{\sigma}.\hat{L}\right)^2 = \left(\vec{\sigma}\cdot\hat{L}\right)\left(\vec{\sigma}\cdot\hat{L}\right) = L^2 + i\vec{\sigma}\cdot\left(\hat{L}\times\hat{L}\right) = L^2 - \hbar\vec{\sigma}\cdot\hat{L}.$$

Ainsi, l'expression de $\hat{K}$ est donnée par :

$$\hat{K} = \hbar + \hat{L}\cdot\vec{\sigma}. \tag{3.1.9}$$

En utilisant cette expression de $\hat{K}$, on obtient, pour un système à symétrie sphérique, le résultat suivant :

$$\vec{\sigma}\cdot\hat{L}\psi\left(r,\hat{r}\right) = \vec{\sigma}\cdot\left(\vec{r}\times\vec{p}\right)\psi\left(r,\hat{r}\right) = -\hbar\left(1+\kappa\right)\psi\left(r,\hat{r}\right). \tag{3.1.10}$$

κ est appelé le nombre quantique de spin-orbite et il prend des valeurs entières $\kappa = \pm\left(j+1/2\right) = \pm1, \pm2, ...$ En utilisant la notation suivante pour les spineurs harmoniques sphériques

$$\chi_{\kappa m} \equiv \Omega_{jlm}, \quad \chi_{-\kappa m} \equiv \Omega_{jl'm}\ , \tag{3.1.11}$$

alors l'action de $\hat{K}$ sur ces deux nouveaux spineurs est donnée par

$$\hat{K}\chi_{\kappa m} \equiv -\hbar\kappa\chi_{\kappa m}, \;\; \hat{K}\chi_{-\kappa m} \equiv \hbar\kappa\chi_{-\kappa m}. \tag{3.1.12}$$

Les équations (1.2.2), (1.2.12) et (3.1.10) permettent d'obtenir les relations très importantes suivantes :

$$\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}\right)F(r)\chi_{\kappa m} = \left(\frac{dF}{dr} + \frac{1+\kappa}{r}\right)\left(\vec{\sigma}\cdot\hat{r}\right)\chi_{\kappa m},$$
$$\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}\right)\left(\vec{\sigma}\cdot\hat{r}\right)F(r)\chi_{\kappa m} = \left(\frac{dF}{dr} + \frac{1-\kappa}{r}\right)\chi_{\kappa m}.$$

En remplaçant ces dernières relations dans l'équation (3.1.4), nous obtenons [3]-[5]

$$\begin{pmatrix} 1+\lambda^2 V(r)-\varepsilon & \lambda\left[\frac{\kappa}{r}+W(r)-\frac{d}{dr}\right] \\ \lambda\left[\frac{\kappa}{r}+W(r)+\frac{d}{dr}\right] & -1+\lambda^2 V(r)-\varepsilon \end{pmatrix}\begin{pmatrix} g(r) \\ f(r) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{3.1.13}$$

Cette équation matricielle génère un couple d'équations différentielles d'ordre 1 qui doivent être résolus simultanément pour obtenir les parties radiales du spineur. En l'absence du potentiel, ces équations ne seront pas de type Schrödinger. Pour obtenir une équation de type Schrödinger nous devons appliquer une transformation globale $w(\eta)=e^{\left(\frac{i}{2}\lambda\eta\sigma_2\right)}$ à la relation (3.1.13), où η est un paramètre constant et σ_2 est la matrice de Pauli. Il est également nécessaire d'imposer la contrainte $V(r)=\zeta\left[W(r)+\frac{\kappa}{r}\right]\Rightarrow W(r)=\frac{1}{\zeta}V(r)-\frac{\kappa}{r}$ avec ζ paramètre réel et $\sin(\lambda\eta)=\pm\lambda\zeta$, pour obtenir une équation de type Schrödinger avec $-\frac{\pi}{2}<\lambda\eta<+\frac{\pi}{2}$.

La transformation unitaire ainsi que d'autres contraintes appliquées au potentiel, nous permettent d'obtenir l'équation suivante :

$$\begin{pmatrix} C-\varepsilon+2\lambda^2 V & \lambda\left(-\zeta+\frac{C}{\zeta}V-\frac{d}{dr}\right) \\ \lambda\left(-\zeta+\frac{c}{\zeta}V+\frac{d}{dr}\right) & -C-\varepsilon \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \phi^+ \\ \phi^- \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.1.14}$$

où $C=\cos(\lambda\eta)=\sqrt{1-(\lambda\zeta)^2}>0$, et

$$\begin{pmatrix} \phi^+ \\ \phi^- \end{pmatrix}=w\psi=\begin{pmatrix} \cos(\frac{\lambda\eta}{2}) & \sin(\frac{\lambda\eta}{2}) \\ -\sin(\frac{\lambda\eta}{2}) & \cos(\frac{\lambda\eta}{2}) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} g \\ f \end{pmatrix}$$

L'équation (3.1.14) conduit à la relation suivante pour les nouvelles fonctions radiales $\phi^+(r)$ et $\phi^-(r)$

$$\phi^{\mp}(r)=\frac{\lambda}{C\pm\varepsilon}\left[-\zeta\pm\frac{C}{\zeta}V(r)+\frac{d}{dr}\right]\phi^{\pm}(r)$$

Nous pouvons, ainsi, dériver l'équation de type schrodinger suivante pour les fonctions $\phi^+(r)$ et $\phi^-(r)$

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\lambda^2}{\zeta^2}V^2 \mp \frac{\lambda}{\zeta}\frac{dV}{dr}+2\varepsilon V-\frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}\right]\phi^{\pm}(r)=0. \tag{3.1.15}$$

Dans la section suivante, nous appliquons cette approche pour résoudre l'équation de Dirac relativiste pour le potentiel de Woods-saxon.

3.2 Solution du potentiel Woods-Saxon

Le potentiel Woods-Saxon en unités atomiques est donné par

$$V(r)= \frac{-V_0}{1+e^{\omega r}} \tag{3.2.1}$$

où ω est une constante liée aux propriétés nucléaires. Afin de résoudre l'équation (3.1.15) pour le potentiel de Woods-saxon, les auteurs dans [13] ont introduit une nouvelle variable x, par $\tanh(\frac{\omega r}{2})=x$. D'après les relations : $\sinh(\frac{\omega r}{2})=\frac{e^{\frac{\omega r}{2}}-e^{-\frac{\omega r}{2}}}{2}$ et $\cosh(\frac{\omega r}{2})=\frac{e^{\frac{\omega r}{2}}+e^{-\frac{\omega r}{2}}}{2}$, on a

$$\begin{aligned}\tanh(\frac{\omega r}{2}) &= \frac{\sin(\frac{\omega r}{2})}{\cos(\frac{\omega r}{2})}\\ &= \frac{e^{\frac{\omega r}{2}}-e^{-\frac{\omega r}{2}}}{e^{\frac{\omega r}{2}}+e^{-\frac{\omega r}{2}}}\\ &= \frac{e^{\omega r}-1}{e^{\omega r}+1}=x\end{aligned} \tag{3.2.2}$$

Pour modifier la partie différentielles dans l'équation(3.1.15), nous avons besoin d'exprimer $\frac{d^2}{dr^2}$ en fonction de $\frac{d}{dx}$ et $\frac{d^2}{dx^2}$. Pour une fonction quelconque $f(r)$, nous pouvons écrire

$$\frac{df}{dr}=\frac{dx}{dr}\frac{df}{dx} \tag{3.2.3}$$

et

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 f}{dr^2} &= \frac{d}{dr}\left(\frac{df}{dr}\right) = \frac{d}{dr}\left(\frac{dx}{dr}\frac{df}{dx}\right) \\
&= \left[\frac{d}{dr}\left(\frac{dx}{dr}\right)\right]\frac{df}{dx} + \frac{dx}{dr}\frac{d^2 f}{dr dx} \\
&= \frac{d^2 x}{dr^2}\frac{df}{dx} + \left(\frac{dx}{dr}\right)^2\frac{d^2 f}{dx^2}.
\end{aligned} \tag{3.2.4}$$

Comme

$$\begin{aligned}
\frac{dx}{dr} &= \frac{\omega}{2}\left(\tanh(\frac{\omega r}{2})\right)' \\
&= \frac{\omega/2}{\cosh^2(\frac{\omega r}{2})},
\end{aligned}$$

de plus, en utilisant le fait que

$$\begin{aligned}
\cosh^2(\frac{\omega r}{2}) - \sinh^2(\frac{\omega r}{2}) = 1 &\Longrightarrow \cosh^2(\frac{\omega r}{2}) - 1 = \sinh^2(\frac{\omega r}{2}) \\
\left(\tanh(\frac{\omega r}{2})\right)^2 &= \frac{\sinh^2(\frac{\omega r}{2})}{\cosh^2(\frac{\omega r}{2})} = \frac{\cosh^2(\frac{\omega r}{2}) - 1}{\cosh^2(\frac{\omega r}{2})} = 1 - \frac{1}{\cosh^2(\frac{\omega r}{2})} \\
\Rightarrow \frac{1}{\cosh^2(\frac{\omega r}{2})} &= 1 - \left(\tanh(\frac{\omega r}{2})\right)^2
\end{aligned}$$

il en résulte que

$$\begin{aligned}
\left(\tanh(\frac{\omega r}{2})\right)' &= \frac{\omega/2}{\cosh^2(\frac{\omega r}{2})} \\
&= \frac{\omega}{2}\left(1 - \tanh^2(\frac{\omega r}{2})\right) \\
&= \frac{\omega}{2}(1 - x^2) = \frac{dx}{dr}
\end{aligned} \tag{3.2.5}$$

En tenant compte de (3.2.5), la première dérivée de (3.2.3) s'écrit finalement

$$\frac{df}{dr} = \frac{dx}{dr}\frac{df}{dx} = \frac{\omega}{2}(1 - x^2)\frac{df}{dx}. \tag{3.2.6}$$

Maintenant, en utilisant $\frac{d^2x}{dr^2} = \frac{d}{dr}(\frac{dx}{dr}) = \frac{d}{dx}(\frac{dx}{dr})\frac{dx}{dr} = -\frac{\omega^2}{2}x(1-x^2)$ dans (3.2.4), on obtient aussi

$$\frac{d^2}{dr^2} = -\frac{\omega^2}{2}x(1-x^2)\frac{d}{dx} + \frac{\omega^2}{4}(1-x^2)^2\frac{d^2}{dx^2}. \tag{3.2.7}$$

Pour exprimer le potentiel et sa dérivée en fonction de x, nous avons d'après (3.2.2)

$$1-x^2 = \frac{4e^{\omega r}}{(1+e^{\omega r})^2} \Rightarrow \frac{dV}{dr} = \frac{V_0\omega e^{\omega r}}{(1+e^{\omega r})^2} = V_0\frac{\omega}{4}\left(1-x^2\right) \tag{3.2.8}$$

et

$$(1-x) = \frac{2}{1+e^{\omega r}} \Rightarrow V = -\frac{V_0}{2}\left(1-x\right). \tag{3.2.9}$$

En remplaçant $\frac{d^2}{dr^2}$, $\frac{dV}{dr}$ et $V(r)$ par leurs expressions respectives (3.2.7), (3.2.8) et (3.2.9) dans l'équation (3.1.15) , on trouve

$$\left[\frac{\omega^2}{2}x(1-x^2)\frac{d}{dx} - \frac{\omega^2}{4}(1-x^2)^2\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\lambda^2}{\zeta^2}\frac{V_0^2}{4}(1-x)^2 + \varepsilon V_0(1-x) \mp \frac{\lambda}{\zeta}V_0\frac{\omega}{4}\left(1-x^2\right) - \frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}\right]\phi^{\pm}(x) = 0. \tag{3.2.10}$$

Posons $\rho = \frac{\lambda V_0}{\zeta}$, l'équation (3.2.10) devient

$$\left[\frac{\omega^2}{2}x(1-x^2)\frac{d}{dx} - \frac{\omega^2}{4}(1-x^2)^2\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\rho^2}{4}(1-x)^2 + \varepsilon V_0(1-x) \mp \frac{\rho\omega}{4}\left(1-x^2\right) - \frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}\right]\phi^{\pm}(x) = 0 \tag{3.2.11}$$

Pour mettre cette équation sous une forme plus adéquate, faisons les simplifications suivantes

$$\begin{aligned}
&[\frac{\omega^2}{2}x(1-x^2)\frac{d}{dx} - \frac{\omega^2}{4}(1-x^2)^2\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\rho^2}{4}\left(1+x^2-2x+1-1\right) + \varepsilon V_0(1-x) \mp \frac{\rho\omega}{4}\left(1-x^2\right) \\
&\qquad - \frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}]\phi^{\pm}(x) = 0, \\
&[\frac{\omega^2}{2}x(1-x^2)\frac{d}{dx} - \frac{\omega^2}{4}(1-x^2)^2\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\rho^2}{4}\left(1-x^2\right) + \frac{\rho^2}{2}(1-x) + \varepsilon V_0(1-x) \mp \frac{\rho\omega}{4}\left(1-x^2\right) \\
&\qquad - \frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}]\phi^{\pm}(x) = 0.
\end{aligned}$$

$$\left[\frac{\omega^2}{2}x(1-x^2)\frac{d}{dx}-\frac{\omega^2}{4}(1-x^2)^2\frac{d^2}{dx^2}-\frac{\rho\,(\rho\pm\omega)}{4}\left(1-x^2\right)+\frac{\rho^2\mp 2\varepsilon V_0}{2}\,(1-x)-\frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}\right]\phi^{\pm}(x)=0. \tag{3.2.12}$$

En divisant cette dernière équation par $-\frac{\omega^2}{4}(1-x^2)$, nous obtenons finalement l'équation suivante

$$\left[(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2}-2x\frac{d}{dx}-\frac{\rho\,(\rho\mp\omega)}{\omega^2}-\frac{\rho^2\mp 2\varepsilon V_0}{\omega^2}\frac{2}{(1+x)}+\frac{4}{\omega^2}\frac{1}{(1-x^2)}\frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}\right]\phi^{\pm}(x)=0. \tag{3.2.13}$$

En définissant $\phi^{\pm}=C_n^{\pm}u(x)P_n^{\alpha,\beta^{\pm}}(x)$, où $u(x)$ est une fonction à déterminée, $P_n^{\alpha,\beta}(x)$ est le polynome de Jacobi d'ordre n et β^+,β^- sont reliés aux spineurs de signes $\pm$ respectivement [11]. En dérivant par rapport à x, nous obtenons :

$$\begin{aligned}\phi^{\pm\prime}&=C_n^{\pm}u'P_n+C_n^{\pm}uP_n',\\ \phi^{\pm\prime\prime}&=C_n^{\pm}u''P_n+2C_n^{\pm}u'P_n'+C_n^{\pm}uP_n''.\end{aligned}$$

Remplacons les deux expressions précédentes dans l'équation (3.2.13)

$$\begin{aligned}&(1-x^2)\left(C_n^{\pm}u''P_n+2C_n^{\pm}u'P_n'+C_n^{\pm}uP_n''\right)+2x\left(C_n^{\pm}u'P_n+C_n^{\pm}uP_n'\right)+\\ &\qquad\left[\tfrac{\rho(\rho\pm\omega)}{\omega^2}+\tfrac{\rho^2+2\varepsilon V_0}{\omega^2}\tfrac{2}{(1+x)}-\tfrac{4}{\omega^2}\tfrac{1}{(1-x^2)}\tfrac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}\right]C_n^{\pm}uP(x)=0,\\ &(1-x^2)C_n^{\pm}u''P_n+2(1-x^2)C_n^{\pm}u'P_n'+(1-x^2)C_n^{\pm}uP_n''+2xC_n^{\pm}u'P_n+2xC_n^{\pm}uP_n'+\\ &\qquad\left[\tfrac{\rho(\rho\pm\omega)}{\omega^2}+\tfrac{\rho^2\pm 2\varepsilon V_0}{\omega^2}\tfrac{2}{(1+x)}-\tfrac{4}{\omega^2}\tfrac{1}{(1-x^2)}\tfrac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}\right]C_n^{\pm}uP(x)=0\end{aligned}$$

Divisons par $u(x)$ pour obtenir

$$\begin{aligned}(1-x^2)P_n''+\left((1-x^2)\frac{2u'}{u}+2x\right)P_n'+\big[(1-x^2)\frac{u''}{u}+2x\frac{u'}{u}+\frac{\rho(\rho\pm\omega)}{\omega^2}\\ +\frac{\rho^2\pm 2\varepsilon V_0}{\omega^2}\frac{2}{(1+x)}-\frac{4}{\omega^2}\frac{1}{(1-x^2)}\frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}\big]P(x)=0.\end{aligned} \tag{3.2.14}$$

L'équation de jacobi standard peut être donnée par

$$\left(1-x^2\right) P_n''(x) - [\alpha-\beta+(\alpha+\beta+2)\,x]\, P'(x) + n\,(\alpha+\beta+n+1)\, P(x) = 0 \quad (3.2.15)$$

En comparant les équations (3.2.14) et (3.2.15) pour le coefficient de $P_n'(x)$, nous obtenons

$$\begin{aligned}
(1-x^2)\frac{2u'}{u} + 2x &= -\alpha+\beta-(\alpha+\beta+2)\,x, \\
(1-x^2)\frac{2u'}{u} &= -\alpha+\beta-(\alpha+\beta)\,x, \\
(1+x)(1-x)\frac{2u'}{u} &= \beta\,(1-x) - \alpha\,(1+x)\,,
\end{aligned}$$

finalement

$$\frac{u'}{u} = \frac{\beta}{2\,(1+x)} - \frac{\alpha}{2\,(1-x)}.$$

Après l'intégration, nous obtenons

$$\begin{aligned}
\int \frac{u'}{u} &= \int \left(\frac{\beta}{2\,(1+x)} - \frac{\alpha}{2\,(1-x)}\right) dx \\
\ln u &= \frac{1}{2}\left(\alpha\ln(1-x) + \beta\ln(1+x)\right) + cst \\
u(x) &= e^{\frac{1}{2}(\alpha\ln(1-x)+\beta\ln(1+x))} \\
u(x) &= (1-x)^{\frac{\alpha}{2}}(1+x)^{\frac{\beta}{2}},
\end{aligned}$$

Egalement, en comparant les coefficients de $P_n(x)$, nous obtenons les conditions suivantes

$$\left[(1-x^2)\frac{u''}{u} + 2x\frac{u'}{u} + \frac{\rho\,(\rho\pm\omega)}{\omega^2} + \frac{\rho^2 \pm 2\varepsilon V_0}{\omega^2}\frac{2}{(1+x)} - \frac{4}{\omega^2}\frac{1}{(1-x^2)}\frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}\right] = n\,(\alpha+\beta+n+1)\,. \quad (3.2.16)$$

Nous pouvons calculer $\frac{u''}{u}$ et $\frac{u'}{u}$ comme suit, on a d'abord

$$u(x) = (1-x)^{\frac{\alpha}{2}}(1+x)^{\frac{\beta}{2}}.$$

La première dérivée

$$u'(x) = -\frac{\alpha}{2}(1-x)^{\frac{\alpha}{2}-1}(1+x)^{\frac{\beta}{2}} + \frac{\beta}{2}(1-x)^{\frac{\alpha}{2}}(1+x)^{\frac{\beta}{2}-1},$$

et la deuxième dérivée

$$u''(x) = \frac{\alpha}{2}\left(\frac{\alpha}{2}-1\right)(1-x)^{\frac{\alpha}{2}-2}(1+x)^{\frac{\beta}{2}} - \frac{\alpha}{2}(1-x)^{\frac{\alpha}{2}-1}\frac{\beta}{2}(1+x)^{\frac{\beta}{2}-1} - \frac{\alpha}{2}\frac{\beta}{2}(1-x)^{\frac{\alpha}{2}-1}(1+x)^{\frac{\beta}{2}-1} + \frac{\beta}{2}(1-x)^{\frac{\alpha}{2}}\left(\frac{\beta}{2}-1\right)(1+x)^{\frac{\beta}{2}-2}.$$

va nous permèttre d'écrire

$$\frac{u'(x)}{u(x)} = -\frac{\alpha}{2(1-x)} + \frac{\beta}{2(1+x)}$$

et

$$\frac{u''(x)}{u(x)} = \frac{\alpha}{2}\left(\frac{\alpha}{2}-1\right)\frac{1}{(1-x)^2} - \frac{\alpha\beta}{2}\frac{1}{1-x^2} + \frac{\beta}{2}\left(\frac{\beta}{2}-1\right)\frac{1}{(1+x)^2}.$$

En remplaçant $\frac{u'(x)}{u(x)}$ et $\frac{u''(x)}{u(x)}$ dans (3.2.16) , on obtient

$$[(1-x^2)\left(\frac{\alpha}{2}\left(\frac{\alpha}{2}-1\right)\frac{1}{(1-x)^2} - \frac{\alpha\beta}{2}\frac{1}{1-x^2} + \frac{\beta}{2}\left(\frac{\beta}{2}-1\right)\frac{1}{(1+x)^2}\right) + 2x\left(-\frac{\alpha}{2(1-x)} + \frac{\beta}{2(1+x)}\right) + \frac{\rho(\rho\pm\omega)}{\omega^2} + \frac{\rho^2\pm 2\varepsilon V_0}{\omega^2}\frac{2}{(1+x)} - \frac{4}{\omega^2}\frac{1}{(1-x^2)}\frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}] = n\left(\alpha+\beta+n+1\right)$$

$$[\left(\frac{\alpha}{2}\left(\frac{\alpha}{2}-1\right)\frac{(1+x)}{(1-x)} - \frac{\alpha\beta}{2} + \frac{\beta}{2}\left(\frac{\beta}{2}-1\right)\frac{(1-x)}{(1+x)}\right) - \frac{x\alpha}{(1-x)} + \frac{x\beta}{(1+x)} + \frac{\rho(\rho\pm\omega)}{\omega^2} + \frac{\rho^2\pm 2\varepsilon V_0}{\omega^2}\frac{2}{(1+x)} - \frac{4}{\omega^2}\frac{1}{(1-x^2)}\frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}] = n\left(\alpha+\beta+n+1\right)$$

Multiplions par $(1-x^2)$

$$[\frac{\alpha}{2}\left(\frac{\alpha}{2}-1\right)(1+x)(1+x) - \frac{\alpha\beta}{2} + \frac{\beta}{2}\left(\frac{\beta}{2}-1\right)(1-x)(1-x) - x\alpha(1+x) + x\beta(1-x) + \frac{\rho(\rho\pm\omega)}{\omega^2}(1-x^2) + \frac{\rho^2\pm 2\varepsilon V_0}{\omega^2}2(1-x) - \frac{4}{\omega^2}\frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}] = n\left(\alpha+\beta+n+1\right)(1-x^2)$$

$$[\frac{\alpha}{2}\left(\frac{\alpha}{2}-1\right)(1+2x+x^2) - \frac{\alpha\beta^{\pm}}{2} + \frac{\beta\pm}{2}\left(\frac{\beta^{\pm}}{2}-1\right)(1-2x+x^2) - x\alpha(1+x) + x\beta^{\pm}(1-x) + \frac{\rho(\rho\pm\omega)}{\omega^2}(1-x^2) + \frac{\rho^2\pm 2\varepsilon V_0}{\omega^2}2(1-x) - \frac{4}{\omega^2}\frac{\varepsilon^2-1}{\lambda^2}] = n\left(\alpha+\beta^{\pm}+n+1\right)(1-x^2)$$

En comparant les coefficients de x, x^2 et des constantes dans les deux côtés de cet équation, nous obtenons des relations suivantes pour le β^+, le β^- et l'énergie ε respectivement

$$\frac{\alpha}{2}\left(\frac{\alpha}{2}-1\right)-\frac{\beta^{+}\alpha}{2}+\frac{\beta^{+}}{2}\left(\frac{\beta^{+}}{2}-1\right)+\frac{\rho\left(\rho+\omega\right)}{\omega^{2}}+2\frac{\rho^{2}+2\varepsilon V_{0}}{\omega^{2}}-\frac{4}{\omega^{2}}\frac{\varepsilon^{2}-1}{\lambda^{2}}=n\left(\alpha+\beta^{+}+n+1\right)$$

$$\alpha\left(\frac{\alpha}{2}-1\right)-\beta^{+}\left(\frac{\beta^{+}}{2}-1\right)-\alpha-\beta^{+}-2\frac{\rho^{2}+2\varepsilon V_{0}}{\omega^{2}}=0$$

$$\frac{\alpha}{2}\left(\frac{\alpha}{2}-1\right)+\frac{\beta^{+}}{2}\left(\frac{\beta^{+}}{2}-1\right)-\alpha-\beta^{+}-\frac{\rho\left(\rho+\omega\right)}{\omega^{2}}=-n\left(\alpha+\beta^{+}+n+1\right)$$

et

$$\frac{\alpha}{2}\left(\frac{\alpha}{2}-1\right)-\frac{\beta^{-}\alpha}{2}+\frac{\beta^{-}}{2}\left(\frac{\beta^{-}}{2}-1\right)+\frac{\rho\left(\rho-\omega\right)}{\omega^{2}}+2\frac{\rho^{2}-2\varepsilon V_{0}}{\omega^{2}}-\frac{4}{\omega^{2}}\frac{\varepsilon^{2}-1}{\lambda^{2}}=n\left(\alpha+\beta^{-}+n+1\right)$$

$$\alpha\left(\frac{\alpha}{2}-1\right)-\beta^{-}\left(\frac{\beta^{-}}{2}-1\right)-\alpha-\beta^{-}-2\frac{\rho^{2}-2\varepsilon V_{0}}{\omega^{2}}=0$$

$$\frac{\alpha}{2}\left(\frac{\alpha}{2}-1\right)+\frac{\beta^{-}}{2}\left(\frac{\beta^{-}}{2}-1\right)-\alpha-\beta^{-}-\frac{\rho\left(\rho-\omega\right)}{\omega^{2}}=-n\left(\alpha+\beta^{-}+n+1\right).$$

En résolvant les deux membres des d'équations au-dessus, on obtient le ε et le β comme suit :

$$\frac{4}{\omega^{2}}\frac{\varepsilon^{2}-1}{\lambda^{2}}=-\alpha^{2}\Rightarrow\varepsilon=\left(1-\alpha^{2}\frac{\omega^{2}\lambda^{2}}{4}\right)^{1/2}$$

et

$$\beta^{+}=\left[\alpha\left(\alpha-4\right)-4\frac{\rho^{2}+2\varepsilon V_{0}}{\omega^{2}}\right]^{1/2}$$

$$\beta^{-} = \left[\alpha\left(\alpha - 4\right) - 4\frac{\rho^2 - 2\varepsilon V_0}{\omega^2}\right]^{1/2}$$

Alors, la fonction d'onde propre peut être écrite comme :

$$\begin{aligned}
\phi^{\pm}(x) &= C^{\pm}u(x)P_n^{\alpha,\beta^{\pm}}(x) \\
&= C^{\pm}(1-x)^{\frac{\alpha}{2}}(1+x)^{\frac{\beta}{2}}P_n^{\alpha,\beta^{\pm}}(x) \\
&= C^{\pm}(1-\tanh\frac{\omega r}{2})^{\frac{\alpha}{2}}(1+\tanh\frac{\omega r}{2})^{\frac{\beta}{2}}P_n^{\alpha,\beta^{\pm}}(\tanh\frac{\omega r}{2})
\end{aligned}$$

Dans la limite $\lambda \to 0$, quand $\frac{\alpha^2\omega^2\lambda^2}{4} \ll 1$, on peut développer ε et obtenir :

$$\varepsilon \approx 1 - \frac{\alpha^2\omega^2\lambda^2}{8}.$$

Pour le cas non-relativiste nous avons

$$\varepsilon \approx 1 - \lambda^2 E.$$

En comparant ces deux relations pour ε, on arrive finalement à

$$E = \frac{\alpha^2\omega^2}{8}. \tag{3.2.17}$$

Conclusion générale

L'idée fondamentale de ce mémoire est de développer des méthodes de résolution pour l'équation de Dirac, avec des potentiels à symétrie sphérique. On a examiné, dans ce cadre, le potentiel de Coulomb et le potentiel de Woods-Saxon avec deux approches différentes mais similaires.

Dans le premier chapitre, on a établi la solution de l'équation de Dirac libre en coordonnées sphériques. La foction d'onde est une fonction de Bessel sphérique indéxée par le nombre quantique orbital l.

Dans le deuxième chapitre, l'équation d'onde a été établie dans le cas d'une particule de spin $\frac{1}{2}$, soumise à un potentiel de Coulomb. Dans le cas stationnaire, une méthode de résolution, basée sur une séparation de variables, a été proposée pour l'équation d'onde. La fonction d'onde qui décrit le système est un produit des fonctions radiales sous forme de séries de type Frobinius alors que les spineurs harmoniques sphériques décrivent la partie angulaire de la fonction d'onde. Ensuite, on a établi l'expression des niveaux d'énergie des états liées et on a donné les valeurs de l'énergie des premiers niveaux.

Le troisième chapitre est une application d'une nouvelle approche pour résoudre l'équation de Dirac avec le potentiel de Woods-Saxon. Au terme de ce travail, il a été démontré que le potentiel de Woods-saxon peut être résolu pour des particules relativistes. Les parties radiales de la fonction d'onde, correspondantes au spin inférieur et au spin supérieur, ont été dérivées comme une série des polynôme de Jacobi. Aussi, les valeurs propres de l'énergie ont été calculées.

Annexes

A Addition des moments cinétiques

L'opérateur moment cinétique total

En mécanique classique, on définit le moment cinétique total d'un système de deux particules comme la somme des moments cinétiques de ces deux particules $L_{tot} = L_1 + L_2$. De la même façon, considérons en mécanique quantique deux observables de moment cinétique $j_1$et j_2 agissant dans des espaces de Hilbert différents ε_1 et ε_2. Il poura s'agir par exemple d'un système de deux particules, $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ est alore l'éspace $\pounds^2(R^3)$ des fonctions de carré sommable en r_1, r_2. Il pourra égalment s'agir d'une particule dans l'espace, $\varepsilon_1 = \pounds^2(R^3)$, pourvue d'un spin 1/2, $\varepsilon_2 = \varepsilon_{spin}$. L'espace de Hilbert du système global est le produit tensoriel : $\varepsilon = \varepsilon_1 \otimes \varepsilon_2$.

Par définition, l'observable moment cinétique total du système est :

$$\hat{J} = \hat{J_1} + \hat{J_2} = \hat{J_1} \otimes \hat{I_1} + \hat{J_2} \otimes \hat{I_2}$$

Où $\hat{I}_1$,$\hat{I}_2$ est l'opérateur identité dans $\varepsilon_1, \varepsilon_2$. Cette observable qui agit dans ε est une observable de moment cinétique. En effet, elle satisfait les relations de commutation : $\hat{J} \times \hat{J} = i\hbar\hat{J}$. Puisque $\hat{J}_1$et $\hat{J}_2$ commutent, nous pouvons diagonaliser simultanément $\hat{J}^2$ et $\hat{J}_z$. Nous connaissons l'ensemble de leurs valeurs propre possible : $\hbar^2 j(j+1)$ avec j entier ou demi entier pour $\hat{J}^2$ et $\hbar m$ avec $m = -j, -j+1 \ldots ..j$ pour $\hat{J}_z$.

Nous pouvons vérifier que les quatre observables de moment cinétique $\hat{J}_1^2$, $\hat{J}_2^2$, $\hat{J}^2$ et $\hat{J}_z$,commutent. Notons $| \, j_1, j_2; j, m >$ leurs vecteurs propres communs ; on a par définition :

$$\hat{J}_1^2 \mid j_1, j_2; j, m >= j_1(j_1+1)\hbar^2 \mid j_1, j_2; j, m > \tag{A.1}$$

$$\hat{J}_2^2 \mid j_1, j_2; j, m >= j_2(j_2+1)\hbar^2 \mid j_1, j_2; j, m > \tag{A.2}$$

$$\hat{J}^2 \mid j_1, j_2; j, m >= j(j+1)\hbar^2 \mid j_1, j_2; j, m > \tag{A.3}$$

$$\hat{J}_z \mid j_1, j_2; j, m >= m\hbar^2 \mid j_1, j_2; j, m > \tag{A.4}$$

Base découplée et base couplée

L'espace ε correspondant aux degrés de liberté associés ou moment cinétique est engendré par la famille des états factorisés : $\{\mid j_1, m_1 > \otimes \mid j_1, m_1 >\} = \{\mid j_1,\ j_2; j, m >\}$. Dans cette base, les observables $\hat{J}_1^2,\ \hat{J}_{1z}^2,\ \hat{J}_2^2,\ \hat{J}_{2z}$ sont diagonales. Plaçons-nous dans le sous-espace propre des deux observables $\hat{J}_1^2$ et $\hat{J}_2^2$ correspondant à des valeurs données de $j_1$et j_2. La dimension de ce sous-espace est $(2j_1{+}1)$ $(2j_2{+}1)$. Autrement dit, nous désirons effectuer dans chaque sous-espace propre de $\hat{J}_1^2$ et $\hat{J}_2^2$ un changement de base pour passer de la base propre découplée, commune à ($\hat{J}_1^2,\ \hat{J}_{1z}^2,\ \hat{J}_2^2,\ \hat{J}_{2z}$), à la base propre couplée, commune à ($\hat{J}_1^2,\ \hat{J}_{1z}^2,\ \hat{J}_2^2,\ \hat{J}_{2z}$). Les valeurs propres de $\hat{J}_1^2$ et $\hat{J}_z$ vont s'exprimer comme des fonction de j_1, j_2, m_1 et m_2. Une fois cette détermination des valeurs de j effectuée, nous exprimerons les états propres $\mid j_1,\ j_2; j, m >$ en fonction des états $\mid j_1,\ m_1; j_2, m_2 >$:

$$\mid j_1, j_2; j, m >= \sum_{m_1 m_2} C^{j,m}_{j_1,m_1;j_2m_2} \mid j_1, m_1; j_2, m_2 > \tag{A.5}$$

$$C^{j,m}_{j_1,m_1;j_2m_2} =< j_1, m_1; j_2, m_2 \mid j_1, j_2; j, m > \tag{A.6}$$

les coefficients $C^{j,m}_{j_1,m_1;j_2m_2}$ du changement de base $(A.6)$ sont appelés coeficients de Clebsch-Gordan [1] .

La parité de la fonction d'onde

L'opération parité, ou l'inversion spatiale, est une transformation de Lorentz discrète qui consiste à inverser les 3 coordonnées d'espace. C'est une transformation discrète qui correspond à une symétrie par rapport à l'origine des coordonnées :

$$\begin{cases} x_1 \longrightarrow -x_1 \\ x_2 \longrightarrow -x_2 \\ x_3 \longrightarrow -x_3 \end{cases} \tag{A.7}$$

En mécanique quantique, à l'opération parité est associé un opérateur $\hat{p}$ qui possède les propriétés suivantes

- $\hat{p}$ est unitaire : $\hat{p}\hat{p}^{+} = \hat{p}^{+}\hat{p} = 1$,
- $\hat{p}^2 = 1$, plus l'unitarité $\Longrightarrow \hat{p} = \hat{p}^{+} = \hat{p}^{-1} \Longrightarrow \hat{p}$ est hermitien.

Unitariste + herméticité $\Longrightarrow \hat{p}$ est une observable. Il existe donc un nombre quantique associé à l'opération parité.

En coordonnées sphérique cette transformation s'exprime comme suit :

$$\begin{cases} r \longrightarrow r, \\ \theta \longrightarrow \pi - \theta, \\ \phi \longrightarrow \pi + \phi. \end{cases} \tag{A.8}$$

Puisqu'elle est égale au produit d'une symétrie-miroir par rapport à $\widehat{xoy}$ et d'une rotation de180 degrés autour de oz. Par une telle transformation les Y_l^m au plus changent de singe : ce sont des fonction de parité déterminée. Appliquons la transformation précédente (A.8) sur la fonction d'onde décrivant une telle particule. Celle-ci peut se mettre sous la forme à variables séparées suivante :[3]

$$\Psi\,(r, \theta, \phi) = G(r) Y_l^M(\theta, \phi). \tag{A.9}$$

Comme la partie radiale $G(r)$ est invariante sous parité, alors l'action de l'operateur P sur la fonction d'onde Ψ se réduit à son action sur l'harmonique sphérique d'ordre l. En effet,

$$P\left(G(r)Y_l^M(\theta,\phi)\right)=G(r)PY_l^M(\theta,\phi) \tag{A.10}$$

Puisque l'opérateur parité P commute avec $\vec{L}$ et que le couple (l,m) spécifie complètement l'état propre de $(\vec{L}^2, L_z)$, le vecteur $\mid lm>$ est un vecteur propre de P ; avec les valeurs propres : $P\mid lm>=\pm\mid lm>$. Par ailleurs $[P, L_\pm]=0$, donc $\mid lm>$ et $\mid lm\pm 1>$ ont la méme valeur propre. Tout les états $\{\mid lm>\}\,, -l\leq m\leq l$ ont, donc, la méme parité, qui est celle de $Y_{ll}=c_l\left(\sin\theta\right)^l e^{il\phi}$. Dans l'inversion d'espace, $\sin\theta$ est invariant et il vient seulement une phase $e^{il\pi}=\left(-1\right)^l$.Finalement

$$PY_l^m\left(\theta,\phi\right)=Y_l^m\left(\pi-\theta,\phi+\pi\right)=\left(-1\right)^l Y_l^m\left(\theta,\phi\right). \tag{A.11}$$

Chacune des deux parties de l'harmonique sphérique se transforme, d'aprés $(A.8)$, comme suit :

$$\begin{aligned}&\phi\longrightarrow\pi+\phi\Longrightarrow e^{iM\phi}\longrightarrow(-1)^M e^{iM\phi}, \qquad\qquad (A.12)\\ &\theta\longrightarrow\pi-\theta\Longrightarrow P_l^M(\cos\theta)\longrightarrow P_l^M(-\cos\theta)=(-1)^{l-M}P_l^M(\cos\theta),\end{aligned}$$

En remplaçant $(A.11)$ dans $(A.9)$, on aboutit à une équation aux valeurs propres :

$$P\Psi\left(r,\theta,\phi\right)=(-1)^l\Psi\left(r,\theta,\phi\right). \tag{A.13}$$

C'est la parité de l'état d'une particule de moment orbital l.

B Spineurs sphériques

Considérons un système physique constitué de deux parties. Supposons que la première partie est décrite par les harmoniques sphériques Y_{lm}, fonctions propres du moment orbital l, et la deuxième partie par les spineurs spin $\chi_{1/2m_s}$, vecteurs propres du spin $s=\frac{1}{2}$. Alors la fonction d'onde du système total est donnée par l'expression suivante

$$\Omega_{jlm} = \sum_{m',m_s} (l1/2j \mid m'm_s m) Y_{lm'} \chi_{1/2m_s}, \tag{B.1}$$

En considérant que le couplage spin-orbital (interaction entre le spin de la particule et son moment orbital) est négligeable, alors conformément au modèle vectoriel d'addition des moments cinétiques, le moment cinétique total est $J = l + 1/2$. Dans ce cas, en remplaçant dans $(B.1)$ les coefficients de CG, les fonctions d'onde d'un tel système s'expriment comme suit :

$$\Omega_{l+1/2,l,m} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+m}{2j}}\chi_{1/2}Y_{l,m-1/2} \\ \sqrt{\frac{j-m}{2j}}\chi_{-1/2}Y_{l,m+1/2} \end{pmatrix}, \tag{B.2}$$

$$\Omega_{l-1/2,l,m} = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}}\chi_{+1/2}Y_{l,m-1/2} \\ \sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}}\chi_{-1/2}Y_{l,m+1/2} \end{pmatrix}, \tag{B.3}$$

où les spineurs

$$\chi\left(+1/2\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{B.4}$$

$$\chi\left(-1/2\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

décrivent la particule dans les états, de spin $+1/2$ et $-1/2$, respectivement. Ce sont des vecteurs propres des matrices de Pauli, relies au spin de la particule par la relation,

$$\vec{S} = \hbar\frac{\vec{\sigma}}{2} \tag{B.5}$$

De plus, les fonctions décrivant une particule de moment orbital l sont les harmoniques sphérique. Ils sont définis, dans notre cas, par :

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_{l,|m|}(\cos\theta) e^{im\phi}. \tag{B.6}$$

En tenant compte de $(B.4)$ et $(B.6)$, les spineurs sphériques pour les deux valeurs de moment cinétique total $j = l \pm 1/2$ s'expriment sous la forme :

$$\Omega_{\underbrace{l+1/2}_{j},l,m} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+m}{2j}} Y_{l,m-1/2} \\ \sqrt{\frac{j-m}{2j}} Y_{l,m+1/2} \end{pmatrix} \tag{B.7}$$

$$\Omega_{\underbrace{l-1/2}_{j},l,m} = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}} Y_{l,m-1/2} \\ \sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}} Y_{l,m+1/2} \end{pmatrix} \tag{B.8}$$

Ces spineurs sphérique sont normalisés par la condition[2]

$$\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \Omega^\dagger_{j'l'm'}(\theta,\phi)\Omega_{jlm}(\theta,\phi) = \delta_{j'j}\delta_{l'l}\delta_{m'm}. \tag{B.9}$$

C Fonctions de Bessel sphériques

Lorsque υ n'est pas entier, les solutions $y(x)$ de l'équation de bessel

$$x^2 y'' + xy' + (x^2 - \upsilon^2)y = 0 \tag{C.1}$$

sont données par

$$y(x) = C_1 J_\upsilon(x) + C_2 J_{-\upsilon}(x), \tag{C.2}$$

avec

$$J_\upsilon(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^\upsilon \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!\Gamma(j+\upsilon+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2j} \tag{C.3}$$

En posant $y(x) = x^{1/2} z(x)$ et $\upsilon = l + 1/2$, on obtient l'équation

$$x^2 z'' + 2xz' + \left[x^2 - l(l+1)\right] z = 0 \tag{C.4}$$

La solution générale $(C.4)$ déduite de celle de $(C.1)$ est donnée par

$$z(x) = C_1' j_l(x) + C_2' n_l(x), \tag{C.5}$$

avec

$$j_l(x) = \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} J_{l+1/2}(x), \tag{C.6}$$

et

$$n_l(x) = (-1)^l \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} J_{-l-1/2}(x). \tag{C.7}$$

Les fonction $j_l(x)$ et $n_l(x)$ sont appelées fonction de Bessel sphérique et fonction de Neumann sphérique, respectivement. Les facteurs additionnels sont introduits pour simplifier les formules ultérieures. Le wronskien de ces solutions est

$$j_l'(x) n_l(x) - j_l(x) n_l'(x) = x^{-2}.$$

Les fonction j_l et n_l ont la particularité parmi les fonction de Bessel d'étre des fonction élémentaires données par

$$\begin{aligned} j_l(x) &= (-1)^l x^l \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x}, \\ n_l(x) &= (-1)^l x^l \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right) \frac{\cos x}{x}. \end{aligned} \tag{C.8}$$

Ces relations peuvent étre démontées à partir des séries de Taylor de $\sin x$ et $\cos x$ et de développement (1.2.16) . On en déduit que

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}$$

$$n_0(x) = \frac{\cos x}{x}$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$$

$$j_1(x) = \frac{\cos x}{x^2} + \frac{\sin x}{x}$$

De (1.2.18) (1.2.17) et (1.2.16), on déduit les comportements à l'origine

$$j_l(x) \underset{x \longrightarrow 0}{\longrightarrow} \frac{x^l}{(2l+1)!!}$$

$$n_l(x) \underset{x \longrightarrow 0}{\longrightarrow} (2l+1)!!x^{-l-1}$$

avec $m!! = m\,[(m-2)!!]$ et $0!! = (-1)!! = 1$. De (1.2.19), on déduit les comportements asymptotiques

$$j_l(x) \underset{x \longrightarrow 0}{\longrightarrow} \frac{1}{x}\sin(x - \frac{1}{2}l\pi),$$

$$j_l(x) \underset{x \longrightarrow 0}{\longrightarrow} \frac{1}{x}\cos(x - \frac{1}{2}l\pi),$$

qui sont trés importants pour la théorie des collisions .

On a les relations de récurrence suivantes

$$(2l+1)x^{-1}f_l(x) = f_{l+1} + f_{l-1}(x), \tag{C.9}$$

$$f_l'(x) = lx^{-1}f_l(x) - f_{l+1}(x),$$

où $f_l \equiv j_l$, n_l.

Numériqument, la relation de récurrence $(C.9)$ est instable pour $j_l(x)$ quand x est petit, pour des l croissants. Par contre, elle est stable pour des l décroissants.

Ces propriétés peuvent aussi étre écrites pour les fonctions

$$\tilde{j}_l(x) = x j_l(x),$$
$$\tilde{n}_l(x) = x n_l(x).$$

Leurs comportements à l'origine sont donnés par

$$\tilde{j}_l(x) \underset{x \longrightarrow 0}{\longrightarrow} \frac{x^{l+1}}{(2l+1)!!},$$

$$\tilde{n}_l(x) \underset{x \longrightarrow 0}{\longrightarrow} (2l+1)!!x^{-l},$$

et les comportements asymportements asymptotique par

$$\tilde{j}_l(x) \underset{x \longrightarrow 0}{\longrightarrow} \sin(x - \frac{1}{2}l\pi),$$
$$\tilde{n}_l(x) \underset{x \longrightarrow 0}{\longrightarrow} \cos(x - \frac{1}{2}l\pi).$$

Bibliographie

[1] R. Durrer, mécanique quantique 2 : cours $2^{\text{émé}}$ année,2004-2005.

[2] J-L. Basdevant, J. Dalibard, Mécanique quantique : Cours de l'école polytechnique, Février 2002.

[3] A. D. Alhaidari, Phys. Rev. Lett. 87, 210405 (2001) ; 88, 189901 (2002).

[4] A. D. Alhaidari, J. Phys. A 34, 9827 (2001).

[5] A. D. Alhaidari, 35, 6207 (2002) ; Phys. Rev. A 65, 042109 (2002) ; 66, 019902 (2002).

[6] J-Y Guo, J. Meng, and F-X Xu, Chin. Phys. Lett. 20, 602 (2003).

[7] V. R. Ghazaryan and A. M. Ishkhanyan, J. Contemp. Phys. 38, 1 (2003).

[8] A. Wachter, Relativistic Quantum Mechanics, Springer 2011.

[9] W. Greiner, Relativistic Quantum Mechanics, Wave Equations, 3rd edition, Springer 1987.

[10] A. Belabbas, Les potentiels non Gravitationnels et la Structure de l'Espace-temps, Mémoire de Magister, Université A. Mira Béjaia, arXiv :0906.2519, 2006.

[11] J. Y. Guo, Q. Sheng, Phys. Lett. A 338(2) (2005), 90-96.

[12] M. R. Pahlavani, J. Sadeghi and M. Ghezelbash, Applied Sciences, Vol.11, 2009, pp. 106-113.

[13] J. Sadeghi, M. R. Pahlavani, D. Naderi, and A. Banijamali, *Solution of the Relativistic Dirac Equation for Woods-Saxon potentiel.*

[14] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, Tables of Integrals, Series, and Products, Corrected and Enlarged Edition, Academic Press, Inc, New York (1980).