Mécanique quantique d'une particule non relativiste confinée une surface : méthode de confinement

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons décrire la dynamique d'une particule rigidement liée à une surface par l'action d'un potentiel externe qu'on l'appel potentiel de confinement en se basant sur la référence [1]. Ce potentiel devrait être nul (ou constant) le long de la surface, mais pour chaque petit déplacement de la particule vers la direction normale, ce potentiel augmente fortement et tend vers l'infini. En raison du confinement latéral, les énergies d'excitation quantique dans la direction normale deviennent beaucoup plus élevées que dans la direction tangentielle. Désormais, on peut ignorer le mouvement des particules dans la direction normale. Dans ce cas, on constate qu'en raison de la courbure de la surface, un potentiel scalaire de nature purement quantique apparaît dans l'équation de Schrödinger bidimensionnelle. Ce potentiel s'écrit en fonction de la courbure moyenne et la courbure de Gauss. Ainsi, nous allons expliquer en détail cette méthode de confinement pour une particule non relativiste et nous donnons une application sur une particule confinée entre deux cylindres coaxiaux.

3.2 Particule liée à une surface

On considère une particule de masse m liée à une surface (S) bidimensionnelle d'équations paramétriques $\mathbf{r} = \mathbf{r}\left(q^1, q^2\right)$. Le voisinage très proche de cette surface est paramétrisé par le vecteur :

$$\mathbf{R}\left(q^1, q^2, q^3\right) = \mathbf{r}\left(q^1, q^2\right) + q^3 \mathbf{n}\left(q^1, q^2\right) \tag{3.1}$$

où $\mathbf{n}$ est un vecteur normal à la surface (S) en un point donné. La coordonnée q^3 indique la distance entre ce point de la surface et un point Q de coordonnées (q^1, q^2, q^3). Comme évoqué dans l'introduction, on va considérer maintenant le potentiel de confinement qui est modélisé en général par la forme suivante :

$$\lim_{\lambda \to \infty} V_\lambda\left(q^3\right) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad q^3 = 0 \\ \infty & \text{si} \quad q^3 \neq 0 \end{cases} \tag{3.2}$$

où λ est un paramètre introduit pour assurer la forme indiquée ci-dessus. Par exemple, on peut penser à un potentiel de confinement harmonique $V_\lambda\left(q^3\right) = \frac{1}{2} m \lambda^2 \left(q^3\right)^2$ où $\lambda \to \infty$.

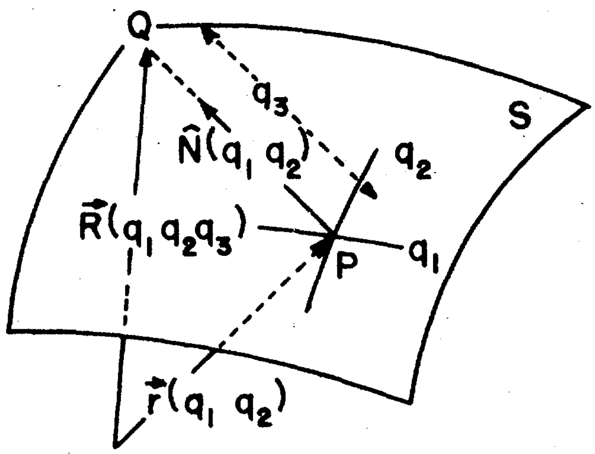

FIG 3-2 : Le voisinage trés proche d'une particule liée sur une surface

On commence par rappeler l'équation (2.37) :

$$\mathbf{n}_i = \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial q^i} = \alpha_i^k \mathbf{r}_k \ , \quad i, k = 1, 2 \tag{3.3}$$

où les coefficients α_i^k sont donnés explicitement dans le chapitre précédent par les formules de Weignarten (2.47) et (2.48). Dérivons l'équation (3.1) par rapport à q^i

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^i} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^i} + q^3 \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial q^i}, \qquad i = 1, 2 \tag{3.4}$$

tenir compte (3.3), il vient :

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^i} = \left(\boldsymbol{\delta}_i^k + q^3\alpha_i^k\right)\mathbf{r}_k, \qquad i = 1,2 \tag{3.5}$$

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^3} = \mathbf{n} \tag{3.6}$$

Dans un voisinage tri-dimensionnelle de (S), la composante covariante du tenseur métrique est :

$$G_{ij} = G_{ji} = \left(\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^i}, \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^j}\right) \quad , \quad i,j = 1,2,3 \tag{3.7}$$

Montrons maintenant pour $i,j = 1,2$ on a :

$$G_{ij} = g_{ij} - 2b_{ij}q^3 + g^{ks}b_{si}b_{kj}\left(q^3\right)^2 \tag{3.8}$$

En effet,

$$\begin{aligned}
G_{ij} &= \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^i} \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^j} = \left(\boldsymbol{\delta}_i^k + q^3\alpha_i^k\right)\mathbf{r}_k.\left(\boldsymbol{\delta}_j^s + q^3\alpha_j^s\right)\mathbf{r}_s \\
&= \left(\boldsymbol{\delta}_i^k + q^3\alpha_i^k\right)\left(\boldsymbol{\delta}_j^s + q^3\alpha_j^s\right)\mathbf{r}_k.\mathbf{r}_s \\
&= \boldsymbol{\delta}_i^k\boldsymbol{\delta}_j^s\mathbf{r}_k.\mathbf{r}_s + \left[\boldsymbol{\delta}_i^k\alpha_j^s\mathbf{r}_k.\mathbf{r}_s + \alpha_i^k\boldsymbol{\delta}_j^s\mathbf{r}_k.\mathbf{r}_s\right]q^3 + \alpha_i^k\alpha_j^s\mathbf{r}_k.\mathbf{r}_s\left(q^3\right)^2 \\
&= \mathbf{r}_i.\mathbf{r}_j + \left[\alpha_j^s\mathbf{r}_i.\mathbf{r}_s + \alpha_i^k\mathbf{r}_k.\mathbf{r}_j\right]q^3 + \alpha_i^k\alpha_j^s\mathbf{r}_k.\mathbf{r}_s\left(q^3\right)^2 \\
&= g_{ij} + \left[\alpha_j^s g_{is} + \alpha_i^k g_{kj}\right]q^3 + \alpha_i^k\alpha_j^s g_{ks}\left(q^3\right)^2
\end{aligned}$$

on a d'aprés (2.42) :

$$\begin{aligned}
\alpha_j^s g_{is} &= -g_{is}b_j^s = -b_{ij} \\
\alpha_i^k g_{kj} &= -g_{kj}b_i^k = -b_{ji} = -b_{ij} \\
\alpha_i^k\alpha_j^s g_{ks} &= b_i^k b_j^s g_{ks} = g^{ks}b_{si}b_{kj}
\end{aligned}$$

c'est-à-dire

$$G_{ij} = g_{ij} - 2b_{ij}q^3 + g^{ks}b_{si}b_{kj}\left(q^3\right)^2 \tag{3.9}$$

et de plus pour $i,j = 3$ on a

$$G_{i3} = G_{3i} = \left(\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^i}, \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^3}\right) = \left(\left(\boldsymbol{\delta}_i^k + q^3\alpha_i^k\right)\mathbf{r}_k, \mathbf{n}\right) = 0, \quad i = 1,2 \tag{3.10}$$

$$G_{33} = \left(\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^3}, \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q^3}\right) = 1 \tag{3.11}$$

la matrice $\mathbf{G}$ s'écrit donc

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & 0 \\ G_{21} & G_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.12}$$

la première forme quadratique est

$$\begin{aligned} ds^2 &= G_{ij} dq^i dq^j \\ &= \left[g_{ij} - 2b_{ij} q^3 + g^{ks} b_{si} b_{kj} \left(q^3\right)^2 \right] dq^i dq^j + \left(dq^3\right)^2 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Donc on a :

$$\det(\mathbf{G}) = \det(G_{ij}) \quad \text{avec } i, j = 1, 2 \tag{3.14}$$

Ainsi,

$$\boldsymbol{\alpha} = -\,\mathbf{b}\mathbf{g}^{-1} \tag{3.15}$$

$$\det(\mathbf{G}) = \det\left(\mathbf{g} - 2\mathbf{b} q^3 + \mathbf{b}\mathbf{g}^{-1}\mathbf{b}\left(q^3\right)^2\right) \tag{3.16}$$

rappelons aussi d'après (2.46) qu'on a

$$\boldsymbol{\alpha} = -\,\mathbf{b}\mathbf{g}^{-1} \tag{3.17}$$

on peut donc simplifier de plus la dernière relation en écrivant

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{G}) &= \det\left[\left(\mathbf{g}\mathbf{g}^{-1} - 2\mathbf{b}\mathbf{g}^{-1} q^3 + \mathbf{b}\mathbf{g}^{-1}\mathbf{b}\mathbf{g}^{-1}\left(q^3\right)^2\right)\mathbf{g}\right] \\ &= \det\left[\left(\mathbf{I} + 2\boldsymbol{\alpha} q^3 + \boldsymbol{\alpha}^2\left(q^3\right)^2\right)\mathbf{g}\right] \\ &= \det\left(\mathbf{I} + 2\boldsymbol{\alpha} q^3 + \boldsymbol{\alpha}^2\left(q^3\right)^2\right)\det(\mathbf{g}) \end{aligned}$$

c'est-à-dire

$$\det(\mathbf{G}) = g \det\left(\mathbf{I} + \boldsymbol{\alpha} q^3\right)^2 \tag{3.18}$$

si on note $\det(\mathbf{G}) = G$ on a donc

$$\sqrt{G} = \sqrt{g}\det\left(\mathbf{I} + \boldsymbol{\alpha} q^3\right)$$

reste à calculer l'expression

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{I} + \boldsymbol{\alpha} q^3) &= \left(1 + \alpha_1^1 q^3\right)\left(1 + \alpha_2^2 q^3\right) - \alpha_1^2 \alpha_2^1 \left(q^3\right)^2 \\ &= 1 + \left(\alpha_1^1 + \alpha_2^2\right) q^3 + \left(\alpha_1^1 \alpha_2^2 - \alpha_1^2 \alpha_2^1\right)\left(q^3\right)^2 \\ &= 1 + Tr(\boldsymbol{\alpha})\, q^3 + \det(\boldsymbol{\alpha})\left(q^3\right)^2 \end{aligned} \tag{3.19}$$

c'est-à-dire on a finalement la relation

$$\sqrt{G}=\sqrt{g}\left[1+Tr\left(\boldsymbol{\alpha}\right)q^{3}+\det\left(\boldsymbol{\alpha}\right)\left(q^{3}\right)^{2}\right] \tag{3.20}$$

Tournons notre attention maintenant à l'équation de Schrödinger pour la particule de masse m liée à la surface courbe (S) au moyen du potentiel de confinement $V_{\lambda}\left(q^{3}\right)$ donné ci-dessus :

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2}\psi+V_{\lambda}\left(q^{3}\right)\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{3.21}$$

avec ∇^{2} est l'opérateur tri-dimensionnel de Laplace-Beltrami donné par (voir Annexe) :

$$\nabla^{2}\psi=\frac{1}{\sqrt{G}}\partial_{i}\left[\sqrt{G}G^{ij}\partial_{j}\psi\right] \tag{3.22}$$

avec l'abréviation $\partial_{i}=\partial/\partial q^{i}$. Ainsi, on a l'équation :

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{1}{\sqrt{G}}\partial_{i}\left[\sqrt{G}G^{ij}\partial_{j}\psi\right]+V_{\lambda}\left(q^{3}\right)\psi=i\hbar\partial_{t}\psi \tag{3.23}$$

où la métrique $\mathbf{G}$ introduite dans l'équation de Schrödinger est donnée par (3.12). La structure de cette métrique, nous permet de séparer le Laplacien en deux parties ; une partie surfacique notée $\mathfrak{D}\left(q^{1},q^{2}\right)$ donnée par $i,j=1,2$ et une partie normale définie par $i=j=3$. En effet,

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{1}{2G}\left(\partial_{i}G\right)G^{ij}\partial_{j}\psi-\frac{\hbar^{2}}{2m}\partial_{i}\left(G^{ij}\right)\partial_{j}\psi-\frac{\hbar^{2}}{2m}G^{ij}\partial_{ji}\psi&\\ -\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{1}{2G}\left(\partial_{3}G\right)G^{33}\partial_{3}\psi-\frac{\hbar^{2}}{2m}\partial_{3}\left(G^{33}\right)\partial_{3}\psi-\frac{\hbar^{2}}{2m}G^{33}\partial_{33}\psi+V_{\lambda}\left(q^{3}\right)\psi&=i\hbar\partial_{t}\psi\end{aligned} \tag{3.24}$$

$i,j=1,2$. Mais $G^{33}=1$, l'équation précédente se réduit à :

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^{2}}{2m}\left\{\frac{1}{2G}\left(\partial_{i}G\right)G^{ij}\partial_{j}\psi-\partial_{i}\left(G^{ij}\right)\partial_{j}\psi-G^{ij}\partial_{ji}\psi\right\}&\\ -\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{1}{2G}\left(\partial_{3}G\right)\partial_{3}\psi-\frac{\hbar^{2}}{2m}\partial_{33}\psi+V_{\lambda}\left(q^{3}\right)\psi&=i\hbar\partial_{t}\psi\end{aligned} \tag{3.25}$$

Ainsi, on obtient :

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\mathfrak{D}\left(q^{1},q^{2}\right)\psi-\frac{\hbar^{2}}{2m}\left[\frac{\left(\partial_{3}G\right)}{2G}\partial_{3}\psi+\partial_{33}\psi\right]+V_{\lambda}\left(q^{3}\right)\psi=i\hbar\partial_{t}\psi \tag{3.26}$$

avec

$$\mathfrak{D}\left(q^{1},q^{2}\right)=\frac{1}{2G}\left(\partial_{i}G\right)G^{ij}\partial_{j}-\partial_{i}\left(G^{ij}\right)\partial_{j}-G^{ij}\partial_{ji} \tag{3.27}$$

Comme on espère d'obtenir une fonction d'onde surfacique qui dépend seulement des coordonnées q^{1} et q^{2}, on est naturellement amené à introduire une nouvelle fonction d'onde χ pour laquelle on peut écrire la séparation $\chi\left(q^1,q^2,q^3\right)=\chi_t\left(q^1,q^2\right)\chi_n\left(q^3\right)$ et nous pouvons définir ainsi la densité de probabilité surfacique :

$$\rho=\left|\chi_t\right|\int\left|\chi_n\right|^2dq^3 \tag{3.28}$$

La transformation adéquate est :

$$\chi\left(q^1,q^2,q^3\right)=\sqrt{f\left(q^1,q^2,q^3\right)}\psi\left(q^1,q^2,q^3\right) \tag{3.29}$$

puisque l'élément de volume associé est donné par :

$$\begin{aligned} dV &= \sqrt{G}dq^1dq^2dq^3 \\ &= fdSdq^3 \end{aligned} \tag{3.30}$$

avec : $dS=\sqrt{g}dq^1dq^2$ et du fait :

$$\sqrt{G}=\sqrt{g}\left[1+Tr\left(\boldsymbol{\alpha}\right)q^3+\det\left(\boldsymbol{\alpha}\right)\left(q^3\right)^2\right] \tag{3.31}$$

ainsi la fonction f est

$$f=1+Tr\left(\boldsymbol{\alpha}\right)q^3+\det\left(\boldsymbol{\alpha}\right)\left(q^3\right)^2 \tag{3.32}$$

introduisons la transformation (3.29) dans (3.26), nous obtenons :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\mathfrak{D}\left(\chi/\sqrt{f}\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\left(\partial_3G\right)}{2G}\partial_3\left(\chi/\sqrt{f}\right)+\partial_{33}\left(\chi/\sqrt{f}\right)\right] \\ +V_\lambda\left(q^3\right)\left(\chi/\sqrt{f}\right)=i\hbar\partial_t\left(\chi/\sqrt{f}\right) \end{aligned} \tag{3.33}$$

multiplions par $\sqrt{f}$ les deux membres, il vient

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{f}\mathfrak{D}\left(\chi/\sqrt{f}\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\sqrt{f}\frac{\left(\partial_3G\right)}{2G}\partial_3\left(\chi/\sqrt{f}\right)+\sqrt{f}\partial_{33}\left(\chi/\sqrt{f}\right)\right] \\ +V_\lambda\left(q^3\right)\chi=i\hbar\partial_t\chi \end{aligned} \tag{3.34}$$

notons que :

$$\partial_3\left(\chi/\sqrt{f}\right) = \frac{\partial_3\left(\chi\right)}{\sqrt{f}}-\frac{\chi\partial_3\left(f\right)}{2f^{\frac{3}{2}}} \tag{3.35}$$

$$\begin{aligned} \partial_{33}\left(\chi/\sqrt{f}\right) &= \partial_3\left(\frac{\partial_3\chi}{\sqrt{f}}\right)-\frac{1}{2}\partial_3\left(\frac{\chi}{f^{3/2}}\partial_3\left(f\right)\right) \\ &= \frac{\left(\partial_{33}\chi\right)}{\sqrt{f}}-\frac{\left(\partial_3\chi\right)}{f^{3/2}}\left(\partial_3f\right)+\frac{3}{4}\frac{\chi}{f^{5/2}}\left[\partial_3\left(f\right)\right]^2-\frac{1}{2}\frac{\chi}{f^{3/2}}\partial_{33}\left(f\right) \end{aligned} \tag{3.36}$$

et d'apèrs (3.18) et (3.32) on a :

$$G = gf^2 \quad \text{et} \quad \partial_3 G = 2g\left(\partial_3 f\right) f \tag{3.37}$$

il vient

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{f}\mathfrak{D}\left(\chi/\sqrt{f}\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{(\partial_3 f)}{f}\partial_3(\chi) - \frac{[\partial_3(f)]^2}{2f^2}\chi\right. \\ &\left. +(\partial_{33}\chi) - \frac{(\partial_3\chi)}{f}(\partial_3 f) + \frac{3}{4}\frac{\chi}{f^2}[\partial_3(f)]^2 - \frac{1}{2}\frac{\chi}{f}\partial_{33}(f)\right\} + V_\lambda(q_3)\chi = i\hbar\partial_t\chi \end{aligned} \tag{3.38}$$

c'est-à-dire

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{f}\mathfrak{D}\left(\chi/\sqrt{f}\right) - \frac{\hbar^2}{2m}&\left\{(\partial_{33}\chi) + \frac{1}{4}\frac{(\partial_3 f)^2}{f^2}\chi\right. \\ &\left. -\frac{1}{2}\frac{\chi}{f}\partial_{33}(f)\right\} + V_\lambda(q_3)\chi = i\hbar\partial_t\chi \end{aligned} \tag{3.39}$$

qui s'écrit aussi comme

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{f}\mathfrak{D}\left(\chi/\sqrt{f}\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\partial_{33}\chi + \frac{1}{4f^2}\left[(\partial_3 f)^2 - 2f\partial_{33}(f)\right]\chi\right\} \\ +V_\lambda\left(q^3\right)\chi = i\hbar\partial_t\chi \end{aligned} \tag{3.40}$$

on est maintenant prêt à tenir compte de l'effet du potentiel de confinement $V_\lambda(q^3)$. A la limite $\lambda \to \infty$ la fonction d'onde voit deux barrières de potentiel sur les deux côtés de la surface. Comme on ne s'intéresse qu'à la surface, on peut prendre la limite $q^3 \to 0$ c'est-à-dire $f \to 1$ et par suite, on a :

$$\lim_{q^3\to 0}\partial_3 f = Tr\left(\boldsymbol{\alpha}\right) \quad \text{et} \quad \lim_{q^3\to 0}\partial_{33}(f) = 2\det\left(\boldsymbol{\alpha}\right)$$

de plus on a :

$$\lim_{q^3\to 0} G = g$$

et on a d'après (3.8)

$$\lim_{q^3\to 0} G_{ij} = g_{ij} \text{ et } \lim_{q^3\to 0} G^{ij} = g^{ij}$$

Donc la partie surfacique (3.27) se réduit à :

$$\begin{aligned} \mathfrak{D} &= \frac{1}{2g}(\partial_i g)\, g^{ij}\partial_j - \partial_i\left(g^{ij}\right)\partial_j - g^{ij}\partial_{ji} \\ &= \frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i\left(\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\right) \end{aligned} \tag{3.41}$$

Par conséquent l'équation (3.40) a la forme :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_i\left(\sqrt{g}g^{ij}\partial_j\chi\right)-\frac{\hbar^2}{8m}\left\{\left[Tr\left(\boldsymbol{\alpha}\right)\right]^2-4\det\left(\boldsymbol{\alpha}\right)\right\}\chi-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{33}\chi+V_\lambda\left(q^3\right)\chi=i\hbar\partial_t\chi \quad (3.42)$$

avec i, $j=1,2$. Cette dernière équation peut maintenant facilement séparée en partie normale et tangentielle :

$$\chi=\chi_t\left(q^1,q^2,t\right)\chi_n\left(q^3,t\right) \quad (3.43)$$

pour laquelle on a les deux équations

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi_n}{\partial\left(q^3\right)^2}+V_\lambda\left(q^3\right)\chi_n &= i\hbar\frac{\partial\chi_n}{\partial t} \quad \text{(éq. normale)} && (3.44)\\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{g}g^{ij}\frac{\partial\chi_t}{\partial q^j}\right)+V_s\left(q^1,q^2\right)\chi_t &= i\hbar\frac{\partial\chi_t}{\partial t} \quad \text{(éq. tangentielle)} && (3.45)
\end{aligned}$$

l'expression (3.44) est juste l'équation de Schrödinger pour une particule confinée par le potentiel $V_\lambda\left(q^3\right)$. L'équation (3.45) est la plus intéressante en raison du présence du terme lié à la géométrie du surface

$$V_s\left(q^1,q^2\right)=-\frac{\hbar^2}{8m}\left\{\left[Tr\left(\boldsymbol{\alpha}\right)\right]^2-4\det\left(\boldsymbol{\alpha}\right)\right\} \quad (3.46)$$

et peut affecter la dynamique de la particule. Notons en premier lieu que ce terme peut s'écrire, en utilisant les relations (2.74) et (2.75) comme

$$V_s\left(q^1,q^2\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(H^2-\kappa\right) \quad (3.47)$$

où H et κ sont respectivement la courbure moyenne et la courbure de Gauss. Il est important de noter aussi que ce potentiel dépend de la courbure intrinsèque et extrinsèque de la surface. Par conséquent, ce terme n'est pas le même pour deux surfaces isométriques.

Il a été expliqué dans la référence [1] que ce résultat est en désaccord avec le résultat de la mécanique classique où le Lagrangien d'une particule libre sur une surface

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}\left(q^1,q^2,\dot{q}^1,\dot{q}^2\right) &= (1/2)\,m\,(ds/dt)^2=(1/2)\,mg_{ij}\dot{q}^i\dot{q}^j && (3.48)\\
\text{avec } q^3 &= 0 \quad \text{et} \quad \dot{q}^3=0
\end{aligned}$$

dépend uniquement de la métrique de la surface g_{ij}. En effet, en mécanique classique on peut complètement éliminer le degré de liberté dans la direction normale à la surface. Alors que, en mécanique quantique, ce n'est pas un problème trivial en raison de l'existence du principe d'incertitude. Naïvement, si nous prenons $\Delta q^3\to 0$ alors $\Delta p^3\to\infty$, ce qui signifie que l'hamiltonien contient un terme divergent. C'est un peu étrange ! Cependant, ce résultat n'est pas inattendu, car, indépendamment de la petitesse supposée de q^3, l'onde se propage toujours dans une portion tridimensionnelle de l'espace, de sorte que la particule est " au courant " des propriétés externes de la surface (S).

3.3 Application

Comme un exemple des notions données plus haut, on considère une particule confinée sur la surface d'un cylindre de rayon R et d'équations paramétriques

$$\mathbf{r}(\varphi, z) = (R\cos\varphi, R\sin\varphi, z) \tag{3.49}$$

la métrique sur la surface est

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} R^2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

On introduit les coordonnées normales de Gauss (φ, z, τ) définies au voisinage très proche de cette surface dont le vecteur position est

$$\mathbf{R}(\varphi, z, \tau) = \mathbf{r}(\varphi, z) + \tau\mathbf{n}(\varphi, z) \tag{3.50}$$

où $\mathbf{n}$ est un vecteur normale à cette surface au point $P(\varphi, z)$. Cette particule est confinée sur la surface au moyen d'un potentiel de confinement $V(\tau)$ qu'on va définir explicitement dans la suite. L'équation de Schrödinger pour cette particule est

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\tau)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \tag{3.51}$$

Suite à l'étude précédente, on peut écrire directement les deux équations

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi_n}{\partial\tau^2} + V(\tau)\chi_n = i\hbar\frac{\partial\chi_n}{\partial t}, \quad \text{(éq. normale)} \tag{3.52}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\partial^2\chi_t}{\partial\varphi^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi_t}{\partial z^2} + V_s\chi_t = i\hbar\frac{\partial\chi_t}{\partial t}, \quad \text{(éq. tangentielle)} \tag{3.53}$$

avec

$$\begin{aligned} \psi &= \lim_{\tau\to 0}\chi \\ \text{et } \chi &= \chi_t(\varphi, z, t)\,\chi_n(\tau, t), \end{aligned}$$

ici la courbure moyenne $H = -1/2R$ et la courbure de Gauss et $\kappa = 0$. Le potentiel géométrique V_s est donc

$$V_s = -\frac{\hbar^2}{8mR^2}. \tag{3.54}$$

On peut proposer un modèle du potentiel $V(\tau)$ si on suppose que cette particule est confinée entre deux cylindres coaxiaux de rayon $R \pm d/2$, c'est-à-dire ;

$$V_\lambda(\tau) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad |\tau| < d/2 \\ \infty & \text{si} \quad |\tau| \geq d/2. \end{cases} \quad (\lambda = \frac{1}{d}) \text{ pour } \begin{cases} \lambda \to 0 \\ \lambda \to \infty \end{cases} \tag{3.55}$$

De plus, on peut obtenir le potentiel géométrique V_s de l'équation (3.54) en écrivant l'équation de Schrödinger

$$H\Psi = E\Psi, \tag{3.56}$$

avec

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right), \end{aligned}$$

et E est l'énergie de la particule. La fonction d'onde doit satisfaire aux conditions aux limites suivantes :

$$\Psi(r = R \pm d/2, \varphi, z) = 0. \tag{3.57}$$

Posons $\Psi = \frac{1}{\sqrt{r}}\Phi$ l'équation (3.56) devient

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{4r^2}\right)\Phi = E\Phi, \tag{3.58}$$

notons que dans la région entre les deux cylindres on a $r = R + \tau$, ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial \tau}, \\ \frac{1}{r^2} &= \frac{1}{(R+\tau)^2} \simeq \frac{1}{R^2} \end{aligned}$$

où on a négligé les termes linéaires en τ puisque $\tau <<$. On écrit alors

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \frac{1}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{4R^2}\right)\Phi = E\Phi. \tag{3.59}$$

Puis, considérons la séparation des variables suivante :

$$\Phi = \chi(\tau)\,\psi(\varphi, z), \tag{3.60}$$

il vient

$$-\psi\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi}{\partial \tau^2} - \chi\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial \varphi^2} - \chi\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} - \frac{\hbar^2}{8mR^2}\chi\psi = E\chi\psi \tag{3.61}$$

divisons par $\chi\psi$ les deux côtés, on aura

$$-\frac{\hbar^2}{2m\chi}\frac{\partial^2\chi}{\partial\tau^2}-\frac{\hbar^2}{2mR^2\psi}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}-\frac{\hbar^2}{2m\psi}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-\frac{\hbar^2}{8mR^2}=E \tag{3.62}$$

qui s'écrit aussi

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2mR^2\psi\left(\varphi,z\right)}\frac{\partial^2\psi\left(\varphi,z\right)}{\partial\varphi^2}-\frac{\hbar^2}{2m\psi\left(\varphi,z\right)}\frac{\partial^2\psi\left(\varphi,z\right)}{\partial z^2}\\-\frac{\hbar^2}{8mR^2}-E=\frac{\hbar^2}{2m\chi\left(\tau\right)}\frac{\partial^2\chi\left(\tau\right)}{\partial\tau^2}=-\varepsilon=\mathrm{Ctes}\end{aligned} \tag{3.63}$$

donc on a les deux équations

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{R^2}\frac{\partial^2\psi\left(\varphi,z\right)}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2\psi\left(\varphi,z\right)}{\partial z^2}\right)-\frac{\hbar^2}{8mR^2}\psi\left(\varphi,z\right) = \left(E-\varepsilon\right)\psi\left(\varphi,z\right) \tag{3.64}$$

$$\frac{\partial^2\chi\left(\tau\right)}{\partial\tau^2}+k^2\chi\left(\tau\right)=0, \tag{3.65}$$

avec $k^2 = 2m\varepsilon/\hbar^2$ et $\varepsilon > 0$. L'équation (3.64) est similaire à (3.53) où $(E-\varepsilon)$ représente l'énergie surfacique de la particule. On pose donc

$$E_S = E-\varepsilon\ . \tag{3.66}$$

On doit garder à l'esprit que l'énergie E l'énergie totale de la particule et ε l'énergie dù à la barrière transversale soumise sur la particule. On peut calculer ε en appliquant les conditions aux limites à la solution

$$\chi\left(\tau\right)=A\cos k\tau+B\sin k\tau$$

c'est-à-dire

$$\chi\left(\pm d/2\right)=0$$

donc

$$\begin{aligned}A\cos\frac{kd}{2}+B\sin\frac{kd}{2} &= 0\\ A\cos\frac{kd}{2}-B\sin\frac{kd}{2} &= 0\end{aligned}$$

ce système n'admet de solutions non nulles que si son déterminant est nul, il vient

$$\begin{aligned}2\cos\frac{kd}{2}\sin\frac{kd}{2} &= 0\Rightarrow\sin kd=0=\sin n\pi\\ &\Rightarrow\ k=\frac{n\pi}{d},\quad n=1,2,3,....\end{aligned}$$

on aura donc l'énergie

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2md^2} \tag{3.67}$$

avec la solution transverse

$$\chi(\tau) = A\cos k\tau$$

l'équation tangentielle (3.64) devient

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} - \frac{\hbar^2}{8mR^2}\right)\psi(\varphi, z) = E_S\psi(\varphi, z) \tag{3.68}$$

avec

$$E_S = \left(E - \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2md^2}\right) \tag{3.69}$$

Notons que si on passe à la limite $d \to 0$, on a un terme divergent au $2^{éme}$ membre de l'équation précédente. Cependant, pour des valeurs très petites de d mais pas nulles, cette équation décrit bien une particule quasi-bidimensionnelle avec E est l'énergie totale de la particule.

Chapitre 4

Mécanique quantique d'une particule relativiste sur une surface

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons décrire la dynamique d'une particule relativiste confinée sur une surface, par l'action d'un potentiel de confinement. L'idée est d'écrire correctement l'équation de Dirac dans un espace courbe 4-dimensionnel en utilisant le formalisme *des tétrades* ou *vierbein.* On commence donc par écrire une métrique de l'espace-temps, puis on choisit des tétrades correspondantes. Ces tétrades vont nous aider à déterminer les connexions affines spinorielles et on écrit ensuite l'équation de Dirac. Pour décrire une particule relativiste sur une surface, on va introduire un potentiel de confinement sous forme d'un couple minimal. En effet, on va choisir le 4-potentiel $(A_0 \equiv V_\lambda, A = 0)$ **,** cette idée , qui a été utilisée dans la référence [2], est justifiée du fait que le potentiel de confinement a des caractéristiques semblables à un puits infini. L'équation de Dirac ainsi obtenue va nous permettre d'écrire un système d'équations couplées dont le problème majeur et l'expression du potentiel de confinement lui-même. On se limite ici à un exemple simple déjà vu dans le chapitre précédent juste pour expliquer la démarche de la méthode.

4.2 Equation de Dirac dans un espace-temps courbe

Même dans un espace plat euclidien, il pourrait être utile d'utiliser des coordonnées curvilignes ; par exemple, dans les problèmes à symétrie sphérique à 3d, nous obtenons une simplification importante lorsque l'élément $ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2$ est remplacé par $ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\varphi^2$. Dans un espace courbe, nous n'avons pas d'autre choix, car les coordonnées cartésiennes ne peuvent exister que localement, c'est-à-dire dans un voisinage infinitésimal. Un exemple est la surface d'une sphère de rayon R. Les coordonnées sphériques avec r fixé égal au rayon R de la sphère font le travail. Dans ce dernier cas, nous avons affaire à un sous-espace courbe à 2d intégré dans un espace euclidien à 3d. Les coordonnées courbes sont intrinsèques à la surface, et on peut ignorer l'existence d'une dimension radiale.

Dans cette section, nous verrons comment écrire l'équation de Dirac dans un espace courbe. En réalité, ce que nous voulons écrire, c'est l'équation de Dirac covariante pour une métrique arbitraire. Puisque cette équation est écrite pour une métrique arbitraire, nous pouvons également l'utiliser pour écrire l'équation de Dirac pour un espace plat dans n'importe quel système de coordonnées.

Commençons par écrire l'équation de Dirac dans un espace-temps plat [6] pour une particule de masse m et de spin 1/2 en coordonnées cartésienne $x^a = 0, 1, 2, 3$ de la façon suivante

$$(i\hbar\gamma^a \partial_a - mc)\,\psi = 0, \quad a = \; 0, 1, 2, 3 \tag{4.1}$$

où les γ^a sont des matrices constantes liées à la métrique de Minkowski $\eta_{ab} = diag\,(1, -1, -1, -1)$ par

$$\left\{\gamma^a, \gamma^b\right\} = \gamma^a\gamma^b + \gamma^b\gamma^a = 2\eta^{ab}, \tag{4.2}$$

dans cet espace, l'élément ds^2 est

$$ds^2 = \eta_{ab} dx^a dx^b, \quad a, b = 0, 1, 2, 3 \tag{4.3}$$

On peut étendre l'équation de Dirac de l'espace-temps plat à un espace-temps courbe en utilisant le formalisme des tétrades. Ces tétrades $(e^a_{\ \mu})$ et ses inverses $(e_a^{\ \mu})$ nous permettent de transformer entre un référentiel inertiel local et un référentiel global. En effet, dans ce formalisme la métrique $g_{\mu\nu}$ d'un espace-temps courbe et reliée à la métrique de Minkowski par la relation

$$g_{\mu\nu} = e^a_{\ \mu} e^b_{\ \nu} \eta_{ab} \tag{4.4}$$

puisque η_{ab} est une matrice constante, ces tétrades dépendent forcément des coordonnées de l'espace-temps. De plus, ces tétrades vérifient les relations d'orthogonalité

$$e_\mu{}^a e_a{}^\nu = \delta_\mu{}^\nu \quad , \quad e^a{}_\mu e_b{}^\mu = \delta^a{}_b \tag{4.5}$$

et aussi on peut augmenter et baisser les indices comme

$$e_{a\mu} = g_{\mu\nu} e_a{}^\nu \quad , \quad e^a{}_\mu = \eta^{ab} e_{b\mu} \tag{4.6}$$

d'où on tire la relation

$$\eta_{ab} = e_a{}^\mu e_b{}^\nu g_{\mu\nu} \tag{4.7}$$

Ainsi, les tétrades sont utilisées pour transformer les quantités physiques du référentiel plat au référentiel courbe et vice versa.

Pour écrire l'équation de Dirac (4.1) dans un espace-temps courbe, les matrices constantes γ^a doivent être remplacées par des matrices dépendantes des coordonnées $\tilde{\gamma}^\mu$ comme

$$\gamma^a \to \tilde{\gamma}^\mu = e_a{}^\mu \gamma^a, \tag{4.8}$$

et on doit également mettre *la dérivée covariante* au lieu de la dérivée partielle parce que la dérivée partielle d'un spineur ne se transforme pas comme un spineur. La dérivée covariante d'un spineur est donnée par

$$\partial_a \to D_\mu = \partial_\mu + \Gamma_\mu, \tag{4.9}$$

où la connexion affine spinorielle Γ_μ satisfait la relation suivante en termes de matrices de Dirac

$$\Gamma_\mu = \frac{1}{4}\omega_{ab\mu}\gamma^a\gamma^b, \tag{4.10}$$

la quantité $\omega_{ab\mu}$ s'appelle la connexion de spin et peut être calculée à partir de la relation suivante

$$\omega_{ab\mu} = \eta_{ac} e^c{}_\beta \nabla_\mu e_b{}^\beta \tag{4.11}$$

où

$$\nabla_\mu e_b{}^\beta = \partial_\mu e_b{}^\beta + \Gamma^\beta_{\mu\lambda} e_b{}^\lambda. \tag{4.12}$$

les $\Gamma^\beta_{\mu\lambda}$ sont les symboles de Christoffel. Notons que les $\omega_{ab\mu}$ sont antisymétrique par rapport aux indices a et b c'est-à-dire

$$\omega_{ab\mu} = -\omega_{ba\mu} \tag{4.13}$$

Ainsi l'équation de Dirac généralisée pour un espace-temps courbe peut s'écrire

$$(i\hbar\tilde{\gamma}^{\mu}D_{\mu} - mc)\,\psi = 0. \tag{4.14}$$

Exemple 1 : Comme déjà évoqué dans cette section, on va profiter de l'équation (4.14), qui est une équation assez générale, pour écrire explicitement la forme de cette équation pour un espace-temps plat à $(2+1)$ dimensions. En utilisant les coordonnées polaires (r, φ), la métrique est $g_{\mu\nu} = diag\,(1, -1, -r^2)$. Les tétrades et leurs inverses sont

$$e^{a}_{\ \mu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & r \end{pmatrix} \Rightarrow e_{a}^{\ \mu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r} \end{pmatrix} \tag{4.15}$$

En dimension $(2 + 1)$, les matrices 4×4 de Dirac sont réduites aux matrices de Pauli et l'un des choix pour les matrices γ^a , $a = 0, 1, 2$ est

$$\gamma^0 = \sigma_z \quad , \quad \gamma^1 = i\sigma_y \ , \quad \gamma^2 = -i\sigma_x \tag{4.16}$$

donc les matrices de Dirac $\tilde{\gamma}$ d'd'après (4.8) sont

$$\tilde{\gamma}^0 = \gamma^0 = \sigma_z \ , \quad \tilde{\gamma}^1 = \gamma^1 = i\sigma_y, \quad \tilde{\gamma}^2 = \frac{1}{r}\gamma^2 = -\frac{i}{r}\sigma_x \tag{4.17}$$

les symboles de Christoffel non nuls

$$\Gamma^{r}_{\varphi\varphi} = \frac{g^{rr}}{2}\left(-\frac{\partial g_{\varphi\varphi}}{\partial r}\right) = -r \tag{4.18}$$

$$\Gamma^{\varphi}_{r\varphi} = \frac{g^{\varphi\varphi}}{2}\frac{\partial g_{\varphi\varphi}}{\partial r} = \frac{1}{r} \tag{4.19}$$

les connections spinorielles $\omega_{ab\mu}$ non nulles sont

$$\omega_{12\varphi} = -\omega_{21\varphi} = 1 \tag{4.20}$$

les connections affines spinorielles

$$\Gamma_0 = 0, \quad \Gamma_r = 0, \tag{4.21}$$

$$\Gamma_{\varphi} = \frac{1}{4}\omega_{12\varphi}\gamma^1\gamma^2 + \frac{1}{4}\omega_{21\varphi}\gamma^2\gamma^1 = \frac{1}{2}\gamma^1\gamma^2 = -\frac{i}{2}\sigma_z \tag{4.22}$$

L'équation de Dirac (4.14) devient

$$\left\{\sigma_z\partial_0 + i\sigma_y\partial_r - \frac{i}{r}\sigma_x\left(\partial_{\varphi} - \frac{i}{2}\sigma_z\right) - \frac{mc}{i\hbar}\right\}\psi = 0. \tag{4.23}$$

c'est-à-dire

$$\left\{\sigma_z\partial_0 + i\sigma_y\partial_r - \frac{i}{r}\sigma_x\partial_\varphi + \frac{i}{2r}\sigma_y - \frac{mc}{i\hbar}\right\}\psi = 0. \tag{4.24}$$

Exemple 2 : dans un espace-temps plat, l'élément ds^2 en coordonnées sphériques a l'expression

$$ds^2 = c^2dt^2 - dr^2 - r^2\left(d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2\right) \tag{4.25}$$

puisque la métrique $g_{\mu\nu} = diag\left(1, -1, -r^2, -r^2\sin^2\theta\right)$ est diagonale, il est facile de déduire les tétrades et leurs inverses comme

$$e^a_{\ \mu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r\sin\theta \end{pmatrix} \Rightarrow e_a^{\ \mu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{r\sin\theta} \end{pmatrix} \tag{4.26}$$

d'après la relation (4.11), les connections de spin non nulles sont

$$\omega_{21\theta} = -1 \tag{4.27}$$

$$\omega_{31\varphi} = -\sin\theta \tag{4.28}$$

$$\omega_{32\varphi} = -\cos\theta \tag{4.29}$$

ainsi, les connexions affines spinorielles se calculent suivant (4.10) comme

$$\Gamma_{ct} = \Gamma_r = 0 \tag{4.30}$$

$$\Gamma_\theta = \frac{1}{4}\omega_{21\theta}\gamma^2\gamma^1 + \frac{1}{4}\omega_{12\theta}\gamma^1\gamma^2 = \frac{1}{2}\gamma^1\gamma^2 \tag{4.31}$$

$$\begin{aligned}\Gamma_\varphi &= \frac{1}{4}\omega_{31\varphi}\gamma^3\gamma^1 + \frac{1}{4}\omega_{13\varphi}\gamma^1\gamma^3 + \frac{1}{4}\omega_{32\varphi}\gamma^3\gamma^2 + \frac{1}{4}\omega_{23\varphi}\gamma^2\gamma^3 \\ &= \frac{1}{2}\sin\theta\gamma^1\gamma^3 + \frac{1}{2}\cos\theta\gamma^2\gamma^3.\end{aligned} \tag{4.32}$$

4.3 Particule de Dirac sur une surface

On considère une particule de masse m liée à une surface (S) bidimensionnelle d'équations paramétriques $\mathbf{r} = \mathbf{r}\left(q^1, q^2\right)$. Dans un espace ambiant euclidien tridimensionnel, le voisinage très proche de cette surface est décrit par le vecteur

$$\mathbf{R}\left(q, q^3\right) = \mathbf{r}(q) + q^3\mathbf{n}(q), \qquad q = \left(q^1, q^2\right) \tag{4.33}$$

un point de l'espace-temps est caractérisé par les coordonnées $(q^0 = ct, q, q^3)$. Ainsi, l'espace-temps très proche de la surface (S) est décrit par la métrique $\gamma_{\mu\nu}$

$$ds^2 = \gamma_{\mu\nu} dq^\mu dq^\nu, \quad \mu, \nu = 0, 1, 2, 3 \tag{4.34}$$

avec

$$\gamma_{00} = \eta_{00} = 1, \quad \gamma_{33} = \eta_{33} = -1 \tag{4.35}$$

$$\gamma_{ij} = -G_{ij}(q, q_3), \quad i, j = 1, 2 \tag{4.36}$$

où $G_{ij}(q, q_3)$ est la métrique de l'espace décrit dans le troisième chapitre par (3.8) à savoir

$$G_{ij}(q, q^3) = g_{ij} - 2b_{ij}q^3 + g^{ks}b_{si}b_{kj}(q^3)^2 \tag{4.37}$$

ou sous forme matricielle

$$\tilde{\mathbf{G}} = \mathbf{g} - \mathbf{2b}q^3 + \mathbf{bg}^{-1}\mathbf{b}(q^3)^2 \tag{4.38}$$

avec

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{G}} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.39}$$

Explicitement ;

$$ds^2 = (dq^0)^2 - G_{ij}(q, q^3)\, dq^i dq^j - (dq^3)^2, \quad i, j = 1, 2 \tag{4.40}$$

avec $dq^0 = cdt$. La matrice $\boldsymbol{\gamma}$ s'écrit donc

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{G} \end{pmatrix} \tag{4.41}$$

où la matrice $\mathbf{G}$ est donnée par (3.12). Donc $\det(\boldsymbol{\gamma}) = -\det(\mathbf{G}) = -G$. Notons ici que la métrique $\gamma_{\mu\nu}$ n'est pas diagonale. Elle est reliée à la métrique η_{ab} au moyen des tétrades qui sont choisis de façon qu'on a

$$\gamma_{\mu\nu} = e^a{}_\mu e^b{}_\nu \eta_{ab} \tag{4.42}$$

Sous forme matricielle, cette relation s'écrit

$$\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{e}^T \boldsymbol{\eta} \mathbf{e} \tag{4.43}$$

suite aux expressions (4.35) et (4.36) on peut poser

$$\mathbf{e}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & b & 0 \\ 0 & c & d & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.44}$$

où a, b, c et d sont des composantes (des tétrades) à déterminer. Ainsi, on aura directement de (4.43)

$$G_{11} = a^2+c^2 \tag{4.45}$$

$$G_{22} = b^2+d^2 \tag{4.46}$$

$$G_{12} = G_{21}=ab+cd \tag{4.47}$$

pour simplifier, on choisit $c=0$ avec $G_{11}\neq 0$, on obtient

$$a=\sqrt{G_{11}}\ , \quad b=\frac{G_{12}}{\sqrt{G_{11}}}\ , \qquad d=\frac{\sqrt{G}}{\sqrt{G_{11}}} \tag{4.48}$$

Ainsi, les tétrades et leurs inverses sont

$$e^a_{\ \mu}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{G_{11}} & \frac{G_{12}}{\sqrt{G_{11}}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{G}}{\sqrt{G_{11}}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow e_a^{\ \mu}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{G_{11}}} & -\frac{G_{12}}{\sqrt{G}\sqrt{G_{11}}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{G_{11}}}{\sqrt{G}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.49}$$

les matrices de Dirac d'espace courbe $\tilde{\gamma}^\mu$ sont données en terme des matrices constantes γ^a suite au (4.8) comme

$$\tilde{\gamma}^0 = e_a^{\ 0}\gamma^a=\gamma^0 \tag{4.50}$$

$$\tilde{\gamma}^3 = e_a^{\ 3}\gamma^a=\gamma^3 \tag{4.51}$$

$$\tilde{\gamma}^1 = e_a^{\ 1}\gamma^a=\frac{1}{\sqrt{G_{11}}}\gamma^1-\frac{G_{12}}{\sqrt{G}\sqrt{G_{11}}}\gamma^2 \tag{4.52}$$

$$\tilde{\gamma}^2 = e_a^{\ 2}\gamma^a=\frac{\sqrt{G_{11}}}{\sqrt{G}}\gamma^2 \tag{4.53}$$

avec

$$\sqrt{G}=\sqrt{g}\left[1+Tr\left(\boldsymbol{\alpha}\right)q^3+\det\left(\boldsymbol{\alpha}\right)q_3^2\right] \tag{4.54}$$

Passons maintenant à l'équation de Dirac relative à la métrique (4.40)

$$\left(i\hbar\tilde{\gamma}^{\mu}\mathcal{D}_{\mu}-mc\right)\psi=0. \tag{4.55}$$

le potentiel de confinement $V_{\lambda}\left(q^{3}\right)$ vu au chapitre précédent est introduit ici comme couplage minimale

$$A_{0}\equiv V_{\lambda}\left(q_{3}\right), \qquad A=0 \tag{4.56}$$

de façon qu'on a

$$\mathcal{D}_{\nu}=\partial_{\nu}+\Gamma_{\nu}^{\prime} \tag{4.57}$$

et

$$\Gamma_{\nu}^{\prime}=\Gamma_{\nu}+\frac{iq}{c}A_{\nu} \tag{4.58}$$

montrons d'abord que la connections $\Gamma_{0}=0$. En effet,

$$\Gamma_{0}=\frac{1}{4}\omega_{ab0}\gamma^{a}\gamma^{b}, \tag{4.59}$$

avec

$$\omega_{ab0}=\eta_{ac}e^{c}{}_{\beta}\nabla_{0}e_{b}{}^{\beta} \tag{4.60}$$

puisque les tétrades ne dépendent pas du temps, on aura

$$\omega_{ab0}=\eta_{ac}e^{c}{}_{\beta}\Gamma_{0\lambda}^{\beta}e_{b}{}^{\lambda} \tag{4.61}$$

mais

$$\begin{aligned}\Gamma_{0\lambda}^{\beta} &= \frac{\gamma^{\ell\beta}}{2}\left(\frac{\partial\gamma_{\lambda\ell}}{\partial q^{0}}+\frac{\partial\gamma_{\ell0}}{\partial q^{\lambda}}-\frac{\partial\gamma_{0\lambda}}{\partial q^{\ell}}\right)\\ &= 0\end{aligned} \tag{4.62}$$

donc

$$\Gamma_{0}=0 \tag{4.63}$$

Ainsi, l'équation de Dirac devient

$$\left(i\hbar\gamma^{0}\gamma^{3}D_{3}+i\hbar\gamma^{0}\tilde{\gamma}^{i}D_{i}-\gamma^{0}mc\right)\psi=-i\hbar\left(\partial_{0}+\frac{iq}{c}V_{\lambda}\left(q_{3}\right)\right)\psi \tag{4.64}$$

Une représentation standard des matrices de Dirac constantes est donnée par

$$\begin{aligned}\gamma^{0} &= \begin{pmatrix} I & 0\\ 0 & -I\end{pmatrix}, \quad \gamma^{i}=\begin{pmatrix} 0 & \sigma^{i}\\ -\sigma^{i} & 0\end{pmatrix}\\ \alpha^{i} &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma^{i}\\ \sigma^{i} & 0\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{4.65}$$

où I est la matrice unité 2×2 et σ^i sont les matrices de Pauli. Cette représentation est particulièrement pratique car elle met en évidence le caractère spinoriel de la fonction d'onde de la particule et elle sépare les composantes d'énergie positive et négative. Ce but sera en principe achever en écrivant la fonction d'onde comme un bispineur

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{4.66}$$

Cependant, le calcul dans le cas général est très long et assez compliqué, mais c'est faisable. Cela est dû au présence des connections Γ_i qui sont fonctions des matrices de Dirac. C'est pourquoi qu'on va considérer ici un exemple assez simple juste pour montrer la démarche de la méthode. L'exemple est celui d'une particule confinée sur la surface d'un cylindre de rayon R où l'équation paramétrique est

$$\mathbf{r}(\varphi, z) = (R\cos\varphi, R\sin\varphi, z) \tag{4.67}$$

donc on déduit

$$\mathbf{r}_\varphi = (-R\sin\varphi, R\cos\varphi, 0) \tag{4.68}$$

$$\mathbf{r}_z = (0, 0, 1) \tag{4.69}$$

d'où la métrique sur la surface est

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} R^2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.70}$$

le vecteur normal à la surface du cylindre est

$$\mathbf{n}(\varphi, z) = \frac{\mathbf{r}_\varphi \times \mathbf{r}_z}{|\mathbf{r}_\varphi \times \mathbf{r}_z|} = (\cos\varphi, \sin\varphi, 0), \tag{4.71}$$

donc la deuxième forme est représentée par la matrice

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} -R & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.72}$$

la matrice $\boldsymbol{\alpha} = -\,\mathbf{b}\mathbf{g}^{-1}$ est donc

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \frac{1}{R} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.73}$$

Remarquons que $Tr(\boldsymbol{\alpha}) = 1/R$ et $\det(\boldsymbol{\alpha}) = 0$. La métrique de l'espace "euclidien" est

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} G_{\varphi\varphi} & 0 & 0 \\ 0 & G_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.74}$$

avec

$$\begin{aligned} G_{\varphi\varphi} &= (R+\tau)^2 \\ G_{zz} &= 1 \\ G_{\varphi z} &= G_{z\varphi} = 0 \end{aligned}$$

τ représente la coordonnée de l'espace voisinage ($\tau \equiv q^3$) le déterminant G est donc

$$\sqrt{G} = R + \tau = R\left(1 + \frac{\tau}{R}\right) = R\left(1 + Tr\left(\boldsymbol{\alpha}\right)\tau\right)$$

la métrique de l'espace-temps pour un point de l'espace voisinage (ct,φ,z,τ) très proche de la surface est

$$ds^2 = c^2dt^2 - (R+\tau)^2\, d\varphi^2 \; - dz^2 - (d\tau)^2 \;\;, \qquad \tau << \tag{4.75}$$

$\det(\boldsymbol{\gamma}) = \gamma = -(R+\tau)^2$. Les tétrades sont

$$e^a_{\ \mu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & R+\tau & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow e_a^{\ \mu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{R+\tau} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.76}$$

c'est-à-dire, les $e_a^{\ \mu}$ non nulles sont $e_0^{\ 0} = 1$, $e_1^{\ \varphi} = 1/(R+\tau)$, $e_2^{\ z} = 1$ et $e_3^{\ \tau} = 1$. Les matrices gamma $\tilde{\gamma}^\mu$ sont

$$\tilde{\gamma}^0 = \gamma^0 \tag{4.77}$$

$$\tilde{\gamma}^\varphi = \frac{1}{R+\tau}\gamma^1 \tag{4.78}$$

$$\tilde{\gamma}^z = \gamma^2 \tag{4.79}$$

$$\tilde{\gamma}^q = \gamma^3 \tag{4.80}$$

Ainsi, l'équation de Dirac (4.64) se réduit à

$$\left(i\hbar\gamma^0\gamma^3 D_\tau + \frac{i\hbar}{R+q}\gamma^0\gamma^1 D_\varphi + i\hbar\gamma^0\gamma^2 D_z - \gamma^0 mc\right)\psi = \left(-i\hbar\partial_0 + \frac{q\hbar}{c}V\left(\tau\right)\right)\psi \tag{4.81}$$

Maintenant, reste à calculer les connections Γ_τ , Γ_φ et Γ_z. En effet,

$$\Gamma_\tau = \frac{1}{4}\omega_{ab\tau}\gamma^a\gamma^b, \tag{4.82}$$

on a

$$\omega_{ab\tau} = \eta_{ac}e^c{}_\beta\nabla_\tau e_b{}^\beta \tag{4.83}$$

où

$$\nabla_\tau e_b{}^\beta = \partial_\tau e_b{}^\beta + \Gamma^\beta_{\tau\lambda}e_b{}^\lambda. \tag{4.84}$$

on a

$$\begin{aligned}
\Gamma^\beta_{\tau\lambda} &= \frac{\gamma^{\ell\beta}}{2}\left(\frac{\partial\gamma_{\lambda\ell}}{\partial\tau} + \frac{\partial\gamma_{\ell\tau}}{\partial q^\lambda} - \frac{\partial\gamma_{\tau\lambda}}{\partial q^\ell}\right) \\
&= \frac{\gamma^{\varphi\varphi}}{2}\left(\frac{\partial\gamma_{\varphi\varphi}}{\partial\tau}\right) = \frac{1}{2G_{\varphi\varphi}}\left(\frac{\partial G_{\varphi\varphi}}{\partial\tau}\right) \\
&= \frac{1}{R+\tau} = \Gamma^\varphi_{\tau\varphi}
\end{aligned} \tag{4.85}$$

donc

$$\begin{aligned}
\nabla_\tau e_1{}^\varphi &= \partial_\tau e_1{}^\varphi + \Gamma^\varphi_{\tau\varphi}e_1{}^\varphi. \\
&= -\frac{1}{(R+\tau)^2} + \frac{1}{(R+\tau)^2} = 0
\end{aligned} \tag{4.86}$$

c'est-à-dire

$$\Gamma_\tau = 0 \tag{4.87}$$

calculons Γ_φ :

$$\Gamma_\varphi = \frac{1}{4}\omega_{ab\varphi}\gamma^a\gamma^b, \tag{4.88}$$

on a :

$$\begin{aligned}
\omega_{ab\varphi} &= \eta_{ac}e^c{}_\beta\nabla_\varphi e_b{}^\beta \\
&= \eta_{ac}e^c{}_\beta\left(\partial_\varphi e_b{}^\beta + \Gamma^\beta_{\varphi\lambda}e_b{}^\lambda\right) \qquad (4.89) \\
&= \eta_{ac}e^c{}_\beta\left(\Gamma^\beta_{\varphi\lambda}e_b{}^\lambda\right) = 0 \qquad (4.90)
\end{aligned}$$

puisque $\Gamma^\beta_{\varphi\lambda} = 0$. Donc

$$\Gamma_\varphi = 0 \tag{4.91}$$

de même

$$\Gamma_z = \frac{1}{4}\omega_{abz}\gamma^a\gamma^b, \tag{4.92}$$

avec

$$\begin{aligned}
\omega_{abz} &= \eta_{ac}e^c{}_\beta \nabla_z e_b{}^\beta \\
&= \eta_{ac}e^c{}_\beta \left(\partial_z e_b{}^\beta + \Gamma^\beta_{z\lambda}e_b{}^\lambda\right) \\
&= \eta_{ac}e^c{}_\beta \left(\Gamma^\beta_{z\lambda}e_b{}^\lambda\right) = 0
\end{aligned} \tag{4.93}$$

donc

$$\Gamma_z = 0 \tag{4.94}$$

avec la matrice $\boldsymbol{\gamma}$ est explicitement

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -G_{\varphi\varphi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -G_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{4.95}$$

l'équation de Dirac (4.81) devient

$$\left(i\hbar\alpha^3\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{i\hbar}{R+\tau}\alpha^1\frac{\partial}{\partial\varphi} + i\hbar\alpha^2\frac{\partial}{\partial z} - \gamma^0 mc\right)\psi = -i\hbar\left(\partial_0 + \frac{iq}{c}V(\tau)\right)\psi \tag{4.96}$$

Ensuite, on pose

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{4.97}$$

on obtient le système

$$i\hbar\sigma^3\frac{\partial\psi_2}{\partial\tau} + \frac{i\hbar}{R+\tau}\sigma^1\frac{\partial\psi_2}{\partial\varphi} + i\hbar\sigma^2\frac{\partial\psi_2}{\partial z} - mc\psi_1 = \left(\frac{E}{c} + \frac{q\hbar}{c}V(\tau)\right)\psi_1 \tag{4.98}$$

$$i\hbar\sigma^3\frac{\partial\psi_1}{\partial\tau} + \frac{i\hbar}{R+\tau}\sigma^1\frac{\partial\psi_1}{\partial\varphi} + i\hbar\sigma^2\frac{\partial\psi_1}{\partial z} + mc\psi_2 = \left(\frac{E}{c} + \frac{q\hbar}{c}V(\tau)\right)\psi_2 \tag{4.99}$$

Dans le but de continuer notre analyse, on peut proposer à ce stade un modèle du potentiel $V(\tau)$ comme dans le chapitre précédent. On suppose donc que cette particule est confinée entre deux cylindres coaxiaux de rayon $R \pm d/2$, c'est-à-dire ;

$$V(\tau) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad |\tau| < d/2 \\ \infty & \text{si} \quad |\tau| \geq d/2. \end{cases} \tag{4.100}$$

Le système précédent devient

$$i\hbar c\sigma^3\frac{\partial\psi_2}{\partial\tau}+\frac{i\hbar c}{R+\tau}\sigma^1\frac{\partial\psi_2}{\partial\varphi}+i\hbar c\sigma^2\frac{\partial\psi_2}{\partial z} = \left(E+mc^2\right)\psi_1 \tag{4.101}$$

$$i\hbar c\sigma^3\frac{\partial\psi_1}{\partial\tau}+\frac{i\hbar c}{R+\tau}\sigma^1\frac{\partial\psi_1}{\partial\varphi}+i\hbar c\sigma^2\frac{\partial\psi_1}{\partial z} = \left(E-mc^2\right)\psi_2 \tag{4.102}$$

il est facile de vérifier que la composante ψ_1 satisfait l'équation

$$-\frac{\hbar^2c^2}{(R+\tau)^2}\frac{\partial^2\psi_1}{\partial\varphi^2}-\hbar^2c^2\frac{\partial^2\psi_1}{\partial z^2}-\hbar^2c^2\frac{\partial^2\psi_1}{\partial\tau^2}+\frac{i\hbar^2c^2}{(R+\tau)^2}\sigma^2\frac{\partial\psi_1}{\partial\varphi}=\left(E^2-m^2c^4\right)\psi_1 \tag{4.103}$$

ensuite, on considère la transformation unitaire suivante pour éliminer le terme proportionnel à σ^2 ;

$$\psi_1=e^{i\frac{1}{2}\sigma^2\varphi}\phi \tag{4.104}$$

l'équation (4.103) se transforme à

$$-\frac{\hbar^2c^2}{(R+\tau)^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\varphi^2}-\hbar^2c^2\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}-\hbar^2c^2\frac{\partial^2\phi}{\partial\tau^2}-\frac{\hbar^2c^2}{4(R+\tau)^2}\phi=\left(E^2-m^2c^4\right)\phi \tag{4.105}$$

Comme on ne s'intéresse qu'à la surface, on peut prendre la limite $\tau\to 0$ et par suite, on a :

$$-\frac{\hbar^2c^2}{R^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\varphi^2}-\hbar^2c^2\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}-\hbar^2c^2\frac{\partial^2\phi}{\partial\tau^2}-\frac{\hbar^2c^2}{4R^2}\phi=\left(E^2-m^2c^4\right)\phi \tag{4.106}$$

Cette dernière équation peut maintenant facilement séparée en partie normale et surfacique :

$$\phi=\phi_s(\varphi,z)\,\phi_n(\tau) \tag{4.107}$$

on obtient

$$-\frac{\hbar^2c^2}{\phi_s(\varphi,z)\,R^2}\frac{\partial^2\phi_s(\varphi,z)}{\partial\varphi^2}-\hbar^2c^2\frac{\partial^2\phi_s(\varphi,z)}{\phi_s(\varphi,z)\,\partial z^2}-\frac{\hbar^2c^2}{4R^2}-E^2+m^2c^4=\frac{\hbar^2c^2}{\phi_n(\tau)}\frac{\partial^2\phi_n(\tau)}{\partial\tau^2}=-\varepsilon=\text{Ctes} \tag{4.108}$$

on pose

$$E^2-\varepsilon=E_s^2 \tag{4.109}$$

on a donc

$$\left(-\frac{\hbar^2c^2}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}-\hbar^2c^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\frac{\hbar^2c^2}{4R^2}+m^2c^4\right)\phi_s = E_s^2\phi_s \qquad \text{Eq. tangentielle} \tag{4.110}$$

$$-\hbar^2c^2\frac{\partial^2\phi_n(\tau)}{\partial\tau^2} = \varepsilon\phi_n(\tau) \qquad \text{Eq. normale} \tag{4.111}$$

où

$$\varepsilon=E_n^2-m^2c^4 \tag{4.112}$$

4.4 Limite non relativiste

A la limite non relativiste ; $E_s^2 - m^2c^4 \simeq 2mc^2E_N$ l'équation (4.110) s'écrit

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\hbar^2}{8mR^2}\right)\phi_s = E_N\phi_s \tag{4.113}$$

donc on a bien le potentiel géométrique (3.54) et l'équation surfacique du chapitre précédent à savoir

$$V_s = -\frac{\hbar^2}{8mR^2}. \tag{4.114}$$

L'étude ci-dessus est un exemple simple pour traiter une particule relativiste sur une surface. Il est donc intéressant de traiter d'autres problèmes, par exemple, une particule sur une sphère et sur un cône. Cependant, le problème qu'on peut rencontrer est la modélisation du potentiel de confinement pour permettre de découpler l'équation de Dirac.

on a calculé précédemment la courbure de Gauss pour cette surface et on a obtenu $\kappa = 1/r_0^2$. Donc on a bien vérifié la relation.