Université Joseph Fourier. Master 1 Physique
TD de mécanique quantique.

TD n°4 Solution
Particule chargée dans un champ magnétique

1 Hamiltonien d'une particule chargée (ex. de cours)

Réf : [1], chap.3

1. On a

$$\vec{E} = -\overrightarrow{grad}\,(U) - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \qquad \vec{B} = \overrightarrow{rot}\vec{A}$$

2. On notera $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ les composantes d'un vecteur. Les équations de mouvement de Hamilton donnent pour $j = 1, 2, 3$

$$\frac{dx_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_j} = \frac{1}{m}\left(p_j - qA_j\right)$$

(Cela donne $\vec{p} = m\vec{v} + q\vec{A}$ où $\vec{v} = \frac{d\vec{x}}{dt}$ est la vitesse). On a aussi

$$\frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_j} = \left(\sum_{i=1}^{3} \frac{1}{m}\left(p_i - qA_i\right)\left(q\frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right)\right) - q\frac{\partial U}{\partial x_j} = \left(\sum_{i=1}^{3} v_i \left(q\frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right)\right) - q\frac{\partial U}{\partial x_j}$$

Alors

$$m\frac{d^2x_j}{dt^2} = \frac{dp_j}{dt} - q\frac{dA_j}{dt}$$

or

$$\frac{dA_j\left(\vec{x}\left(t\right), t\right)}{dt} = \sum_i \frac{\partial A_j}{\partial x_i}\frac{dx_i}{dt} + \frac{\partial A_j}{\partial t}$$

et

$$E_j = -\frac{\partial U}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial t},$$

Donc

$$\begin{aligned} m\frac{d^2x_j}{dt^2} &= \left(\sum_{i=1}^{3} v_i \left(q\frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right)\right) - q\frac{\partial U}{\partial x_j} - q\left(\sum_i \frac{\partial A_j}{\partial x_i}\frac{dx_i}{dt} + \frac{\partial A_j}{\partial t}\right) \\ &= q\left(\sum_{i=1}^{3} v_i \left(\frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_i}\right)\right) + qE_j \\ &= q\left(v \wedge B\right)_j + qE_j = F_{Lorentz} \end{aligned}$$

On a obtenu l'équation de Newton. En dernière ligne on a utilisé $(v \wedge B)_j = \left(\sum_{i=1}^{3} v_i \left(\frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_i}\right)\right)$ qu'il nous faut montrer maintenant. On a

$$\vec{B} = r\vec{o}t\left(\vec{A}\right) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial X_1} \\ \frac{\partial}{\partial X_2} \\ \frac{\partial}{\partial X_3} \end{bmatrix} \wedge \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 = \frac{\partial A_3}{\partial X_2} - \frac{\partial A_2}{\partial X_3} \\ B_2 = \frac{\partial A_1}{\partial X_3} - \frac{\partial A_3}{\partial X_1} \\ B_3 = \frac{\partial A_2}{\partial X_1} - \frac{\partial A_1}{\partial X_2} \end{bmatrix}$$

et

$$\vec{v} \wedge \vec{B} = \left[\begin{array}{c} v_2 B_3 - v_3 B_2 \\ etc \\ .. \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned} v_2 B_3 - v_3 B_2 &= v_2 \left(\frac{\partial A_2}{\partial X_1} - \frac{\partial A_1}{\partial X_2} \right) + v_3 \left(\frac{\partial A_3}{\partial X_1} - \frac{\partial A_1}{\partial X_3} \right) \\ &= \sum_j v_j \left(\frac{\partial A_j}{\partial X_1} - \frac{\partial A_1}{\partial X_j} \right) \end{aligned}$$

car le terme $j = 1$ est nul. On a donc bien montré que $\sum_j \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) v_j = \left(\vec{v} \wedge \vec{B} \right)_i$.

2 L'effet Aharonov-Bohm (1959)

1. On considère une boucle fermée γ passant par le chemin 1 et revenant par le chemin 2. La boucle entoure le flux. Par conséquent la circulation de $\vec{A}$ est

$$\left(\int_{\gamma_1} \vec{A}.d\vec{l} - \int_{\gamma_2} \vec{A}.d\vec{l} \right) = \int_{\gamma} \vec{A}.d\vec{l} = \int \int_S \vec{\text{rot}} \left(\vec{A} \right) d^2 s = \int \int_S \vec{B} d^2 s = \phi$$

qui est le flux et est non nul. Donc $\vec{A} \neq 0$. On peut supposer en coordonnées polaires $\vec{A}(r, \theta) = A \frac{1}{r} \vec{u}_\theta$, avec $A = \phi / 2\pi$. Ainsi, on calcule sur un cercle de rayon $r > 0$ quelconque, $\int_\gamma \vec{A}.d\vec{l} = \phi$.

2. Rappel : $\vec{p} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{x}} = -i\hbar \vec{grad}$. on calcule tout d'abord pour toute fonction φ :

$$\begin{aligned} \left(\vec{p} - e\vec{A} \right) \left(\exp \left(ie \frac{\chi(x)}{\hbar} \right) \varphi \right) &= -i\hbar \vec{grad} \left(\exp \left(ie \frac{\chi(x)}{\hbar} \right) \varphi(x) \right) - e\vec{A} \exp \left(ie \frac{\chi(x)}{\hbar} \right) \varphi \\ &= -i\hbar \left(\frac{ie}{\hbar} \vec{grad} \chi \right) \exp \left(ie \frac{\chi(x)}{\hbar} \right) \varphi + \exp \left(ie \frac{\chi(x)}{\hbar} \right) (\vec{p}\varphi) - e\vec{A} \exp \left(ie \frac{\chi(x)}{\hbar} \right) \varphi \\ &= \exp \left(ie \frac{\chi(x)}{\hbar} \right) (\vec{p}\varphi) \end{aligned}$$

En appliquant deux fois la formule, on déduit que

$$\begin{aligned} \left(\vec{p} - e\vec{A} \right)^2 \left(\exp \left(ie \frac{\chi(x)}{\hbar} \right) \varphi \right) &= \left(\vec{p} - e\vec{A} \right) \left(\exp \left(ie \frac{\chi(x)}{\hbar} \right) (\vec{p}\varphi) \right) \\ &= \exp \left(ie \frac{\chi(x)}{\hbar} \right) (\vec{p}^2 \varphi) \end{aligned} \tag{1}$$

Supposons donc :

$$\frac{1}{2m} \left(\overrightarrow{p} - e\overrightarrow{A} \right)^2 \psi_1 + V\psi_1 = E\psi_1 \tag{2}$$

Et posons

$$\psi_1(x) = \exp \left(ie \frac{\chi(x)}{\hbar} \right) \psi_0(x) = \exp \left[\frac{ie}{\hbar} \int_{x_0}^{x} \overrightarrow{A}(x').d\overrightarrow{l} \right] \psi_0(x), \qquad x \in \mathcal{D}_1$$

Donc

$$\frac{1}{2m} \left(\overrightarrow{p} - e\overrightarrow{A} \right)^2 \left(e^{ie\frac{\chi}{\hbar}} \psi_0 \right) + V e^{ie\frac{\chi}{\hbar}} \psi_0 = E e^{ie\frac{\chi}{\hbar}} \psi_0$$

et (en utilisant (1)) est équivalente à

$$\frac{1}{2m} \left(\overrightarrow{p} \right)^2 \psi_0 + V\psi_0 = E\psi_0$$

3. On note de même $\psi_2(x)$ l'amplitude de la fonction d'onde ayant suivit le chemin γ_2, et on suppose $\psi_2(x_0) = \psi_1(x_0) = \psi_0(x_0)$. Donc de même,

$$\psi_2(x^*) = \exp\left[\frac{ie}{\hbar}\int_{\gamma_2} \overrightarrow{A}(x').d\overrightarrow{l}\right]\psi_0(x^*)$$

L'amplitude de l'onde sur l'écran, au point x^* est alors donnée par

$$\begin{aligned}\psi_1(x^*) + \psi_2(x^*) &= \left(\exp\left[\frac{ie}{\hbar}\int_{\gamma 1} \overrightarrow{A}(x').d\overrightarrow{l}\right] + \exp\left[\frac{ie}{\hbar}\int_{\gamma 2} \overrightarrow{A}(x').d\overrightarrow{l}\right]\right)\psi_0(x^*) \\ &= \exp\left[\frac{ie}{\hbar}\int_{\gamma 1} \overrightarrow{A}(x').d\overrightarrow{l}\right]\left(1 + \exp\left[\frac{ie}{\hbar}\left(\int_{\gamma 2} \overrightarrow{A}(x').d\overrightarrow{l} - \int_{\gamma 1} \overrightarrow{A}(x').d\overrightarrow{l}\right)\right]\right)\psi_0(x^*)\end{aligned}$$

or $\left(\int_{\gamma 2} \overrightarrow{A}(x').d\overrightarrow{l} - \int_{\gamma 1} \overrightarrow{A}(x').d\overrightarrow{l}\right) = \int_{\gamma} \overrightarrow{A}(x').d\overrightarrow{l} = \phi$ (où $\gamma = \gamma_2 - \gamma_1$ est la boucle qui entoure le flux). Ainsi la densité de probabilité de présence I de l'électron en ce point x est

$$\begin{aligned}I &= |\psi_1(x^*) + \psi_2(x^*)|^2 = \left|1 + e^{ie\phi/\hbar}\right|^2 |\psi_0(x^*)|^2 \\ &= 2\left(1 + \cos(e\phi/\hbar)\right)|\psi_0(x^*)|^2\end{aligned}$$

Conclusion, lorsque le flux ϕ varie, alors l'intensité I varie périodiquement, de façon significative. Ainsi en mécanique quantique le champ magnétique influe sur les électrons même s'il est nul là où la fonction d'onde est importante (chemins 1 et 2). Ce qui compte est que la fonction d'onde "entoure" le flux magnétique. En mécanique classique, le champ $\vec{B}$ n'aurait aucun effet sur les electrons qui passeraient sur les chemins 1 ou 2.

4. La plus petite variation de flux mesurable est donnée par $e\Delta\phi/\hbar = \pi/2$ (ou une fraction). Or $\phi = BS$ où S est la surface. La variation minimale du champ observable est donc

$$\Delta B = \frac{\pi\hbar}{2eS} \simeq 2\mu T$$

3 Niveaux de Landau

1. $\vec{B} = rot\left(\vec{A}\right) = (\partial_x A_y - \partial_y A_x)\vec{e}_z = B\vec{e}_z$. Alors

$$\begin{aligned}H(x, p_x, y, p_y) &= \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - e\vec{A}\right)^2 \\ &= \frac{1}{2m}\left(\left(p_x + \frac{eB}{2}y\right)^2 + \left(p_y - \frac{eB}{2}x\right)^2\right)\end{aligned}$$

2. Pour les unités, $[Q] \equiv \frac{[p_x]}{[\sqrt{\hbar eB}]} \equiv \frac{[p_x]}{\sqrt{[p_x]m[p_x]/m}} \equiv 1$ (pensant à $\frac{d\vec{p}}{dt} \equiv e\vec{v} \wedge \vec{B}$) et $[q] \equiv \frac{[p_x]}{[eBX]} \equiv \frac{[p_x]}{([p_x]/m)m} \equiv 1$. Donc$\left(\hat{Q}, \hat{P}, \hat{q}, \hat{p}\right)$ sont sans dimension. A partir de $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ et $[\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar$, on calcule

$$\left[\hat{Q}, \hat{P}\right] = i, \qquad [\hat{q}, \hat{p}] = i\,\hbar_{eff}$$

et les autres commutateurs sont nuls. On a finalement :

$$2\pi\hbar_{eff} = \frac{\phi_0}{\phi}.$$

3. D'après l'expression de H de la question 1, et l'expression de Q, P on obtient

$$\begin{aligned} H(Q,P,q,p) &= \frac{1}{2m}\left(\left(p_x + \frac{eB}{2}y\right)^2 + \left(p_y - \frac{eB}{2}x\right)^2\right) \\ &= \frac{\hbar eB}{2m}\left(Q^2 + P^2\right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}\left(P^2 + Q^2\right) \end{aligned}$$

4. $H(Q,P,q,p) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(P^2+Q^2\right)$ est un oscillateur harmonique. Les niveaux d'énergie (**niveaux de Landau**) de l'opérateur $\hat{H}$ sont donc :

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Mais les variables (q, p) n'interviennent pas dans l'expression de H. Cela signifie que l'opérateur $\hat{H}$ agit dans l'espace $L^2\left(\mathbb{R}^2_{q,Q}\right) = L^2(\mathbb{R}_q) \otimes L^2(\mathbb{R}_Q)$ comme $\mathrm{Id} \otimes \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2\right)$. Par conséquent chaque niveau est infiniment dégénéré (comme la dimension de l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R}_q)$ des opérateurs $\hat{q}, \hat{p}$).

Références

[1] F. Faure. *Cours de Mécanique quantique pour Master M1 de physique.* http ://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure/enseignement.