

Chapitre 3

Une particule à 3 dimensions sans spin

Dans le chapitre précédent nous avons considéré par simplicité une particule se déplaçant seulement selon une direction x (mouvement à une dimension). Dans ce chapitre nous montrons tout d'abord comment le formalisme du chapitre précédent s'étend pour décrire une particule dans l'espace $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ de dimension 3.

Nous traitons ensuite le cas d'une particule chargée qui subit l'influence d'un champ électromagnétique décrit par les champs de potentiel \vec{A} et V .

3.1 Une particule à 3 dimensions sans spin

3.1.1 Espace des états \mathcal{H}

L'état quantique d'une particule dans l'espace \mathbb{R}^3 est maintenant décrit par une fonction d'onde $\psi(x, y, z)$ à 3 variables, et toujours à valeurs complexes. On utilisera toujours la notation de Dirac $|\psi\rangle$. On posera aussi :

$$\vec{x} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$$

Le produit scalaire entre deux fonctions d'onde est naturellement :

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\psi_1(\vec{x})} \psi_2(\vec{x}) d^3 \vec{x}$$

(où $d^3 \vec{x} = dx dy dz$. C'est une intégrale triple). L'espace des états est constitué des fonctions d'ondes $|\psi\rangle$ de norme finie : $\langle \psi | \psi \rangle < \infty$, noté :

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$$

Les opérateurs différentiels de base sont les opérateurs position et impulsion que l'on regroupe en **opérateurs vectoriels** (i.e. vecteurs dont les composantes sont des opérateurs) :

$$\hat{\vec{x}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \tag{3.1.1}$$

$$\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) \tag{3.1.2}$$

qui sont définis comme ci-dessus, par

$$\begin{aligned}(\hat{x}\psi)(x, y, z) &= x\psi(x, y, z) \\ (\hat{p}_x\psi)(x, y, z) &= -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}(x, y, z)\end{aligned}$$

etc...

On note aussi pour simplifier $\partial_x := \frac{\partial}{\partial x}$ et $\vec{\nabla} = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$ appelé **opérateur nabra**.

3.1.2 L'espace \mathcal{H} comme produit tensoriel $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$

Nous connaissons déjà des bases pour l'espace $\mathcal{H}_x = L^2(\mathbb{R})$ des fonctions d'ondes $\psi(x)$ à une variable x , étudié dans le chapitre précédent : nous connaissons la "base" de position $|x\rangle, x \in \mathbb{R}$, la "base" d'impulsion $|p_x\rangle, p_x \in \mathbb{R}$, la base de l'oscillateur Harmonique $|\phi_n\rangle, n \in \mathbb{N}, \dots$ (il y a une infinité d'autres bases possibles). C'est la même chose pour les espaces \mathcal{H}_y et \mathcal{H}_z associés aux variables y, z . Chaque dimension de l'espace : x, y, z s'appelle un **degré de liberté spatial**. Dans \mathbb{R}^3 il y a donc trois degrés de liberté spatial.

Nous aimerions ici construire des bases de l'espace $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$, fonctions à trois variables (3 degrés de liberté) à partir de ces bases de fonctions à une variable (1 degré de liberté), $L^2(\mathbb{R})$. Autrement dit, comprendre comment l'espace $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ se construit à partir des espaces $\mathcal{H}_x, \mathcal{H}_y$ et \mathcal{H}_z . Nous allons voir que cette construction se fait par le **produit tensoriel**. Le produit tensoriel sera essentiel pour décrire plus généralement l'espace quantique d'une particule ayant des degrés de liberté interne, ou pour décrire l'espace quantique de plusieurs particules. Nous décidons donc d'illustrer cette construction de produit tensoriel dans le cadre simple de fonctions à trois variables, ce qui reste intuitif.

Proposition 3.1.1. *Supposons que $|\phi_{n_x}\rangle, n_x \in \mathbb{N}$ est une base (orthonormée) de $\mathcal{H}_x = L^2(\mathbb{R}_x)$, et de même $|\phi_{n_y}\rangle, |\phi_{n_z}\rangle$ des bases respectives de $\mathcal{H}_y = L^2(\mathbb{R}_y)$ et $\mathcal{H}_z = L^2(\mathbb{R}_z)$. Alors $\phi_{n_x}(x)\phi_{n_y}(y)\phi_{n_z}(z)$ forme une base orthonormée de $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ aussi notée*

$$|\phi_{n_x}\rangle \otimes |\phi_{n_y}\rangle \otimes |\phi_{n_z}\rangle$$

avec $(n_x, n_y, n_z) \in \mathbb{N}^3$. C'est à dire que tout état $\psi \in \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ s'écrit de façon unique :

$$\psi(x, y, z) = \sum_{n_x, n_y, n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} \phi_{n_x}(x)\phi_{n_y}(y)\phi_{n_z}(z), \quad \psi_{n_x, n_y, n_z} \in \mathbb{C} \quad (3.1.3)$$

On dit que \mathcal{H} est l'**espace produit tensoriel** :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z \text{ ou } L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}_x) \otimes L^2(\mathbb{R}_y) \otimes L^2(\mathbb{R}_z)$$

Le signe \otimes s'appelle **produit tensoriel**.

Démonstration. (*) On note :

$$\phi_{n_x}(x) = \langle x | \phi_{n_x} \rangle, \quad n_x \in \mathbb{N}$$

sont les fonctions de base de \mathcal{H}_x . On considère tout d'abord que y, z sont fixes, donc que $\psi(x, y, z)$ dépend seulement de x , et on écrit de façon unique :

$$\psi(x, y, z) = \langle x | \psi(y, z) \rangle = \sum_{n_x} \psi_{n_x}(y, z) \phi_{n_x}(x)$$

La fonction $\psi_{n_x}(y, z) \in \mathbb{C}$ est ici une "composante". On continue de même avec cette fonction, en considérant z fixe et y variable, donnant

$$\psi_{n_x}(y, z) = \sum_{n_y} \psi_{n_x, n_y}(z) \phi_{n_y}(y)$$

et puis finalement $\psi_{n_x, n_y}(z) = \sum_{n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} \phi_{n_z}(z)$. Au total cela donne :

$$\psi(x, y, z) = \sum_{n_x, n_y, n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} \phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z) \quad (3.1.4)$$

Qui montre que en général une fonction $\psi(x, y, z)$ n'est pas juste un produit factorisé de trois fonctions respectivement en x, y, z mais peut toujours s'écrire comme une combinaison linéaire de termes factorisés de la forme $\phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z)$. De plus on a montré que cette décomposition est unique. La décomposition de ψ que l'on a obtenue montre que $|\phi_{n_x} \rangle \otimes |\phi_{n_y} \rangle \otimes |\phi_{n_z} \rangle$ **est une base (orthonormée) de \mathcal{H}** . (On vérifie facilement l'orthonormalité). \square

Remarques

- En notation de Dirac, on ré-écrit (3.1.4) sous la forme :

$$\langle x, y, z | \psi \rangle = \sum_{n_x, n_y, n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} \langle x | \phi_{n_x} \rangle \langle y | \phi_{n_y} \rangle \langle z | \phi_{n_z} \rangle$$

ou encore :

$$|\psi \rangle = \sum_{n_x, n_y, n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z} |\phi_{n_x} \rangle \otimes |\phi_{n_y} \rangle \otimes |\phi_{n_z} \rangle$$

Il signifie que la fonction d'onde $(|\phi_{n_x} \rangle \otimes |\phi_{n_y} \rangle \otimes |\phi_{n_z} \rangle) \in \mathcal{H}$ est $\langle x | \phi_{n_x} \rangle \langle y | \phi_{n_y} \rangle \langle z | \phi_{n_z} \rangle = \phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z)$ qui est un produit de fonctions. On obtient de même la **base de position** de \mathcal{H} notée :

$$\begin{aligned} |\vec{x} \rangle &= |x, y, z \rangle = |x \rangle \otimes |y \rangle \otimes |z \rangle \\ \langle \vec{x} | &= \langle x, y, z | = \langle x | \otimes \langle y | \otimes \langle z | \end{aligned}$$

- Ne pas confondre le produit tensoriel d'espaces vectoriels avec la somme directe d'espaces vectoriels. Voici un rappel de ces deux notions. Si F est un espace vectoriel (e.v.) de dimension N_f , de base $|n_f \rangle, n_f = 1 \rightarrow N_f$ et G est un autre e.v. de dimension N_g , de base $|n_g \rangle, n_g = 1 \rightarrow N_g$, alors nous venons de voir que l'**espace produit tensoriel** est noté

$$E = F \otimes G \quad (3.1.5)$$

et a pour base $|n_f, n_g \rangle = |n_f \rangle \otimes |n_g \rangle$ et est donc de dimension $N_f N_g$. Par contre, l'**espace somme directe**, noté

$$E = F \oplus G$$

a pour base la réunion des vecteurs $|n_f \rangle$ et $|n_g \rangle$, et est donc de dimension $N_f + N_g$. Par exemple $\mathbb{R}^3 = \mathbb{R}^2 \oplus \mathbb{R}$. Voir figure 3.1.1.

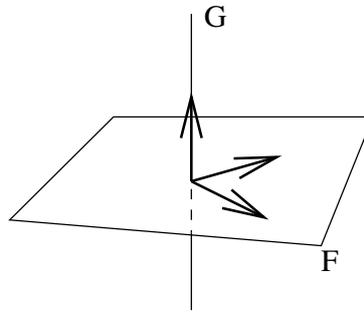


FIGURE 3.1.1 – L'espace total E de dimension 3 est la somme directe $E = F \oplus G$, avec $\dim F = 2$, $\dim G = 1$.

- Voici un schéma (figure 3.1.2) montrant une fonction $\psi(x, y)$ non factorisable en deux fonctions de x et y . Cela traduit une corrélation évidente entre les variables x

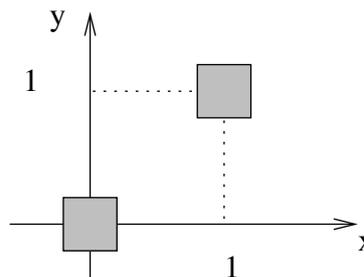


FIGURE 3.1.2 – Cette fonction est $\psi(x, y) = 1$ sur les carrés gris, et $\psi(x, y) = 0$ ailleurs, est non factorisable.

et y . En terme de mesure de la position de la particule, si on observe la particule en $x = 1$, forcément, $y = 1$ (respect. $x = 0$ et $y = 0$). Donc x et y sont des **grandeurs corrélées** dans cet exemple.

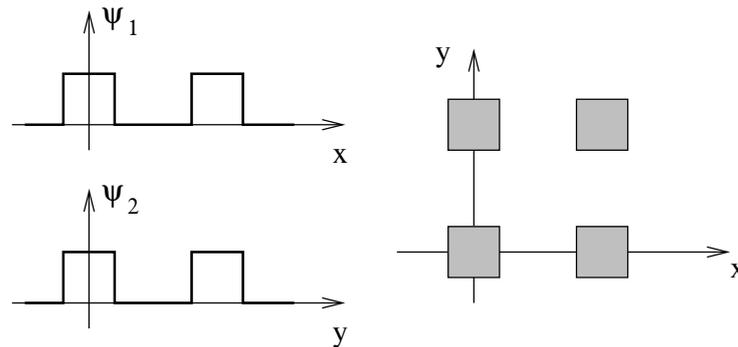


FIGURE 3.1.3 – Cette fonction $\psi(x, y) = 1$ sur les carrés gris, et $\psi(x, y) = 0$ ailleurs est factorisable : $\psi(x, y) = \psi_1(x) \psi_2(y)$

Voici maintenant un schéma montrant une fonction $\psi(x, y) = \psi_1(x) \psi_2(y)$ factorisable en deux fonctions de x et y , figure 3.1.3. Cela correspond au fait qu'il n'y a pas de corrélation entre les grandeurs x et y : Si on observe la particule en $x = 1$, on ne sait pas pour autant si $y = 0$ ou $y = 1$. On dit que x et y sont **dé-corrélés**.

- (*) Dans cette section, on a montré que $L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R})$. Plus généralement, on a donc pour $a, b \in \mathbb{N}$:

$$L^2(\mathbb{R}^{a+b}) = L^2(\mathbb{R}^a) \otimes L^2(\mathbb{R}^b)$$

Exercice 3.1.2. “Action d’une rotation” : Si une particule a la fonction d’onde $\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle$, montrer que l’expression de la fonction d’onde de la même particule dans un repère \vec{x}' obtenu par une rotation $\vec{x}' = R\vec{x}$ (où $R \in SO(3)$ est une matrice orthogonale 3×3) est

$$\psi'(\vec{x}') = \psi(R^{-1}\vec{x}') \quad (3.1.6)$$

Remarques : on note $\psi' = \hat{R}\psi$ et \hat{R} est l’**opérateur rotation**. Puisque que la transformation $\psi(\vec{x}) \rightarrow \psi'(\vec{x}')$ correspond à un changement de repère, on parle de **transformation passive**. Il pourrait s’agir d’un dispositif qui fasse tourner la particule ; on parlerait de **transformation active**.

3.1.3 (*) L’oscillateur Harmonique à 2 dimensions

Voir TD.

3.2 Particule chargée dans un champ électromagnétique

Dans cette section, on cherche à décrire une **particule quantique** subissant les effets d’un **champ électro-magnétique extérieur classique**. On supposera donc que l’influence de la particule sur le champ est négligeable (ex : rayonnement, champ électrostatique ou magnétostatique, cf discussion page 168).

La dynamique d'une particule quantique isolée est décrite par l'équation de Schrödinger eq.(1.3.1). Dans cette équation intervient l'opérateur Hamiltonien qui contient toutes les informations sur la nature de la particule et les forces qu'elle subit.

En général, cet opérateur \hat{H} s'obtient à partir de la fonction de Hamilton classique $H(\vec{x}, \vec{p})$ (qui est l'énergie totale) qui sert à décrire la dynamique de la particule dans le cadre de la mécanique classique, et l'on remplace les variables classiques x, p_x par les opérateurs \hat{x}, \hat{p}_x etc.. Cette opération s'appelle le **principe de correspondance**¹.

Dans ce paragraphe nous allons donc tout d'abord faire un rappel de mécanique classique et d'électromagnétisme classique, et établir la fonction de Hamilton $H(\vec{x}, \vec{p})$ d'une particule classique chargée, dans un champ électromagnétique extérieur. Puis à l'aide du principe de correspondance, on obtiendra l'opérateur Hamiltonien \hat{H} qui permet de décrire la particule quantique.

Attention : dans ce chapitre, on ne décrira pas le spin de la particule (on le supposera figé par exemple). Nous décrirons l'interaction du spin avec le champ, seulement à la fin du chapitre ??.

3.2.1 Dynamique classique et invariance de Jauge

Voir cours de Mécanique Analytique de L3. [Fau10c].

D'après les équations de Maxwell, les champs $\vec{E}(\vec{x}, t)$ et $\vec{B}(\vec{x}, t)$ vérifient² :

$$\begin{aligned}\text{rot}(\vec{E}) &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \text{div}(\vec{B}) &= 0\end{aligned}$$

D'après le Lemme de Poincaré, cela implique que il existe un champ de vecteur $\vec{A}(\vec{x}, t)$ appelé **potentiel vecteur** et une fonction $U(\vec{x}, t)$ appelé **potentiel scalaire** tels que

$$\boxed{\vec{E} = -\vec{\text{grad}}(U) - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \vec{\text{rot}}\vec{A}}$$

Remarque : utilisant les relations $\vec{\text{rot}} \circ \vec{\text{grad}} = 0$ et $\text{div} \circ \vec{\text{rot}} = 0$, on vérifie que ces solutions conviennent. Le lemme de Poincaré assure la réciproque. Voir page 156.

3.2.1.1 Équations de mouvement classique

Soit une particule classique chargée (électron ou autre), de charge q , se déplaçant sous l'effet d'un champ électromagnétique \vec{E}, \vec{B} . Dans la théorie de Newton, cette particule subit

1. Ce principe de correspondance peut sembler artificiel. Il est justifié par la propriété que l'évolution du centre d'un paquet d'onde avec le Hamiltonien quantique \hat{H} et décrit en première approximation par les équations de Hamilton avec le Hamiltonien classique H correspondant.

2. Voir l'appendice pour avoir l'expression de ces opérateurs différentiels et des relations importantes

la **force de Lorentz** $\vec{F}_{Lorentz} = q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$ et cela détermine sa trajectoire d'après l'équation de mouvement de Newton $m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \vec{F}_{Lorentz}$.

La proposition suivante montre que ce mouvement peut être décrit par un certain Hamiltonien.

Proposition 3.2.1. *La fonction Hamiltonien suivante*

$$H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A}(\vec{x}, t))^2 + qU(\vec{x}, t)$$

et les équations de mouvement de Hamilton

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{x}}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \\ \frac{d\vec{p}}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \end{aligned}$$

sont équivalentes à l'équation de Newton

$$m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \vec{F}_{Lorentz} = q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) \quad (3.2.1)$$

L'impulsion est

$$\vec{p} = m\vec{v} + q\vec{A}(\vec{x}, t) \quad (3.2.2)$$

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

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

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

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

Alors

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

or

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

et

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

Donc

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

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

$$\vec{B} = r \vec{ot} (\vec{A}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} \end{bmatrix} \wedge \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 = \frac{\partial A_3}{\partial x_2} - \frac{\partial A_2}{\partial x_3} \\ B_2 = \frac{\partial A_1}{\partial x_3} - \frac{\partial A_3}{\partial x_1} \\ B_3 = \frac{\partial A_2}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_2} \end{bmatrix}$$

et

$$\vec{v} \wedge \vec{B} = \begin{bmatrix} v_2 B_3 - v_3 B_2 \\ etc \\ .. \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} v_2 B_3 - v_3 B_2 &= v_2 \left(\frac{\partial A_2}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_2} \right) + v_3 \left(\frac{\partial A_3}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_3} \right) \\ &= \sum_j v_j \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_j} \right) \end{aligned}$$

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

3.2.1.2 Invariance de Jauge classique

D'après les équations de mouvement de Newton $m d\vec{v}/dt = \vec{F}_{Lorentz}$, et l'expression de $\vec{F}_{Lorentz}$ qui dépend de \vec{E}, \vec{B} , nous savons que le mouvement de la particule est imposé par \vec{E}, \vec{B} et non pas directement par \vec{A}, U . Or différents champs \vec{A}, U donnent les mêmes champs \vec{E}, \vec{B} . En effet, la transformation suivante sur les champs (\vec{A}, U) , appelé **changement de Jauge**, laisse les champs \vec{E}, \vec{B} invariants et donc la trajectoire classique inchangée) :

Proposition 3.2.2. “Invariance de Jauge classique”. si $\chi(\vec{x}, t)$ est une fonction quelconque alors les transformations suivante appelées **changement de Jauge** :

$$\begin{aligned}\vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \overrightarrow{\text{grad}}(\chi) \\ U &\rightarrow U' = U - \frac{\partial \chi}{\partial t}\end{aligned}\quad (3.2.3)$$

impliquent $\vec{p} \rightarrow \vec{p}' = \vec{p} + q \overrightarrow{\text{grad}}(\chi)$ mais \vec{E} , \vec{B} et la trajectoire classique $\vec{x}(t)$ sont inchangés.

Démonstration. On a

$$\vec{E}' = -\overrightarrow{\text{grad}}U' - \partial \vec{A}' / \partial t = -\overrightarrow{\text{grad}}U + \partial(\overrightarrow{\text{grad}}\chi) / \partial t - \partial \vec{A} / \partial t - \partial(\overrightarrow{\text{grad}}\chi) / \partial t = \vec{E}$$

et

$$\vec{B}' = \overrightarrow{\text{rot}}\vec{A}' = \overrightarrow{\text{rot}}\vec{A} + \overrightarrow{\text{rot}}\overrightarrow{\text{grad}}\chi = \overrightarrow{\text{rot}}\vec{A} = \vec{B}$$

Par conséquent la force de Lorentz \vec{F}_{Lorentz} est inchangée et les équations de mouvement Newton sont aussi inchangées. □

3.2.2 Équation de Schrödinger et invariance de Jauge Quantique

Comme expliqué ci-dessus, l'opérateur Hamiltonien \hat{H} s'obtient à partir du Hamiltonien classique par le principe de correspondance en substituant les variables positions et impulsions par les opérateurs différentiels correspondants eq(3.1.1). Cela donne :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\hat{\vec{x}}, t) \right)^2 + qU(\hat{\vec{x}}, t) \quad (3.2.4)$$

et l'équation de Schrödinger qui décrit l'évolution de la fonction d'onde de la particule chargée s'écrit toujours comme eq.(1.3.1) :

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle \quad (3.2.5)$$

$$\Leftrightarrow 0 = \frac{1}{2m} \vec{D}^2 \psi + D_t \psi \quad (3.2.6)$$

dans la deuxième ligne on a fait apparaître les expressions

$$\mathbb{D} := \begin{cases} D_t & := -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + qU \\ \vec{D} & := -i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A} \end{cases}$$

appelée **dérivée covariante**. (c'est un quadri-vecteur).

Proposition 3.2.3. “Invariance de Jauge quantique”. L'équation de Schrödinger est aussi invariante par le changement de Jauge (3.2.3), à condition de faire aussi le changement suivant sur la fonction d'onde :

$$\psi(\vec{x}, t) \rightarrow \psi'(\vec{x}, t) = \exp\left(iq \frac{\chi(\vec{x}, t)}{\hbar}\right) \psi(\vec{x}, t) \quad (3.2.7)$$

$$(3.2.8)$$

Remarque :

- Dans (3.2.7) c'est un changement de la phase de la fonction d'onde différent en chaque point de l'espace-temps.
- Il faut penser aux transformation de Jauge comme à un changement de repère ou de référentiel en mécanique : les coordonnées des objets sont modifiées mais les phénomènes physique sont inchangés.

Démonstration. Supposons que l'équation $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ est vérifiée. On va montrer que $i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = \hat{H}'\psi'$ est alors vérifiée. Utilisant l'écriture (3.2.5) avec la dérivée covariante ci-dessus, on pose \vec{D}', D'_t pour les expressions avec (\vec{A}', U') . On veut donc montrer que $0 = \frac{1}{2m} \vec{D}^2 \psi + D_t \psi$ est équivalent à $0 = \frac{1}{2m} \vec{D}'^2 \psi' + D'_t \psi'$.

Pour cela on va utiliser la relation suivante :

$$\mathbb{D}' \left(\underbrace{e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \psi}_{\psi'} \right) = e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \mathbb{D}(\psi) \quad (3.2.9)$$

qui sera démontrée ci-dessous. Grâce à cette relation on déduit $\vec{D}'(e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \psi) = e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \vec{D}(\psi)$ donc

$$\left(\vec{D}'\right)^2 \left(e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \psi\right) = \vec{D}' \left(\vec{D}' e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \psi\right) = \vec{D}' e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \vec{D}(\psi) = e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \vec{D}^2(\psi)$$

et $D'_t(e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \psi) = e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} D_t(\psi)$. Donc

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{2m} \vec{D}'^2 \psi' + D'_t \psi' \\ \Leftrightarrow 0 &= e^{iq \frac{\chi}{\hbar}} \left(\frac{1}{2m} \vec{D}^2 \psi + D_t \psi \right) \\ \Leftrightarrow 0 &= \left(\frac{1}{2m} \vec{D}^2 \psi + D_t \psi \right) \end{aligned}$$

On a obtenu le résultat. Preuve de (3.2.9) : pour la composante D'_t on a

$$\begin{aligned} D'_t \left(e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \psi \right) &= \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + qU' \right) \left(e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \psi \right) \\ &= -i\hbar e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} i \frac{q}{\hbar} \frac{\partial \chi}{\partial t} \psi - i\hbar e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \frac{\partial \psi}{\partial t} + q \left(U - \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \psi \\ &= e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} D_t(\psi) \end{aligned}$$

et de même pour les composantes spatiales

$$\begin{aligned} \vec{D}' \left(e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \psi \right) &= \left(-i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A}' \right) \left(e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \psi \right) \\ &= -i\hbar e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} i \frac{q}{\hbar} \left(\vec{\nabla} \chi \right) \psi - i\hbar e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \left(\vec{\nabla} \psi \right) - q \left(\vec{A} + \vec{\nabla} \chi \right) e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \psi \\ &= e^{iq\frac{\chi}{\hbar}} \vec{D}(\psi) \end{aligned}$$

□

3.2.3 Effet Aharonov-Bohm

Nous venons de voir que en mécanique classique et quantique il y a une invariance de Jauge. On pourrait penser que les deux résultats sont similaires. Ce n'est pas le cas il y a une différence fondamentale avec l'invariance de Jauge quantique et qui vient du fait que la phase est modifiée dans l'expression (3.2.7). Cela implique des phénomènes qui se manifestent dans des expériences d'interférences proposées par Aharonov et Bohm en 1957 et qui n'ont pas d'équivalent en mécanique classique.

Dans le dispositif expérimental décrit par la figure (3.2.1), un faisceau cohérent d'électrons part de x_0 , puis est séparé en deux, et se recombine dans la région d'interférences x . Cela est similaire à l'expérience des doubles fentes de Young en optique, sauf que la région hachurée entourée par les faisceaux contient un champ magnétique \vec{B} perpendiculaire à la figure. Le champ \vec{B} est nul partout ailleurs, en particulier sur le trajet des faisceaux.

Cependant le *potentiel vecteur* \vec{A} n'est pas nul sur les trajets des électrons. En effet si l'on considère la boucle fermée Γ , allant de x_0 à x^* par le chemin du haut, et revenant par le chemin du bas, on a d'après le théorème de Stokes (cf appendice A.3.1)

$$\oint_{\Gamma} \vec{A} d\vec{l} = \int_{\text{disque}} \text{rot}(\vec{A}) d^2\vec{s} = \int_{\text{disque}} \vec{B} d^2\vec{s} = \phi_B$$

où ϕ_B est le flux (non nul) du champ \vec{B} à travers la boucle Γ . On déduit que \vec{A} est **donc non nul sur le trajet des électrons**. A cause de sa présence dans le Hamiltonien \hat{H} , ce potentiel vecteur \vec{A} est responsable d'une différence de phase entre les deux trajets qui est précisément :

$$\frac{e}{\hbar} \oint \vec{A} d\vec{l} = \frac{e}{\hbar} \phi_B$$

(voir exercice ci-dessous). Par conséquent, l'intensité $I(x)$ des figures d'interférence observées au point x , dépendent directement du flux magnétique $\phi = \int_{\text{disque}} \vec{B} d\vec{s}$.

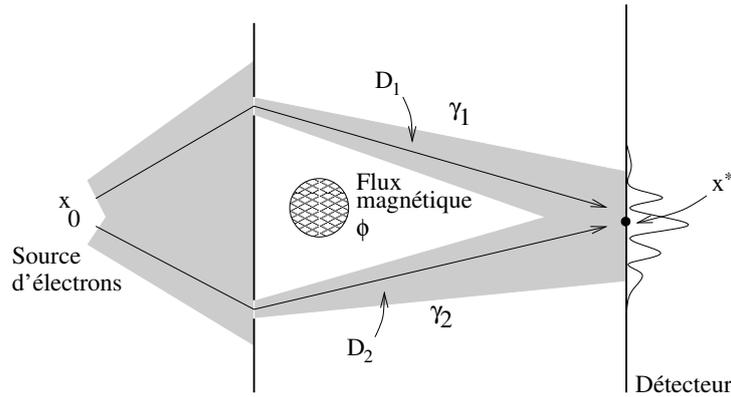


FIGURE 3.2.1 – La fonction d’onde d’un électron est quasiment nulle hors des régions grisées. Le champ magnétique est nul hors de la zone noircie. Cependant les figures d’interférence observées dépendent directement du flux magnétique.

On montre que l’intensité de l’onde au point x du détecteur est (voir TD) :

$$I(x) \simeq \left(1 + \cos\left(\frac{e}{\hbar}\phi_B\right)\right)$$

La conséquence surprenante de cette expérience, est qu’un champ magnétique \vec{B} peut influencer le mouvement d’électrons qui ne le traversent même pas. (Mais dont la fonction d’onde le contourne).

Ce phénomène d’interférences est observé dans des structures semi-conducteurs appelés **SQUID**. Il permet de détecter des changements de champs magnétique très faibles.

Remarque : A l’aide de la “géométrie différentielle” et “la théorie des connexions sur fibrés vectoriels” aussi appelée “théorie de Jauge” on peut formuler l’invariance et les changement de Jauge de façon plus claire. Dans cette formulation il apparaît que la phase d’Aharonov Bohm ϕ_B est une “holonomie”, indépendante du choix de Jauge et pouvant donc se manifester physiquement.

3.2.3.1 (*) Le lemme de Poincaré

Il y a un paradoxe apparent dans l’effet Aharonov Bohm. Voici un argument qui est faux : comme $\vec{rot}\vec{A} = \vec{B} = 0$ sur le chemin de l’électron, on devrait trouver une fonction χ telle que $\vec{grad}\chi = \vec{A}$. Le changement de Jauge $\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} - \vec{grad}(\chi)$ donnerait alors $\vec{A}' = 0$ et aucune influence du flux magnétique ϕ_B sur la phase de l’électron.

Réponse : l’erreur de l’argument précédent est que la propriété mathématique $\vec{B} = \vec{rot}\vec{A} = 0 \Rightarrow \exists\chi, tq \vec{A} = \vec{grad}\chi$ n’est pas valable sur le domaine gris de la figure (3.2.1) (d’ailleurs, une preuve que l’on ne peut annuler \vec{A} est que $\oint \vec{A} d\vec{l} = \phi_B \neq 0$). Cette propriété mathématique n’est valable que sur un domaine \mathcal{D} de l’espace **simplement connexe**, c’est

à dire où tout chemin en boucle peut se déformer continument vers un point en restant dans ce domaine.

Plus généralement, les formules bien connues de calcul différentiel

$$\begin{aligned} \vec{\text{grad}} f = 0 &\Rightarrow f = \text{cste} \\ \vec{\text{rot}} \vec{u} = 0 &\Rightarrow \exists f, \text{tg } \vec{u} = \vec{\text{grad}} f \\ \text{div } \vec{v} = 0 &\Rightarrow \exists \vec{u}, \text{tg } \vec{v} = \vec{\text{rot}} \vec{u} \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

sont valable sur un domaine \mathcal{D} de l'espace qui est contractible, c'est à dire déformable en un point ; et ne contenant donc pas de trous. Cette propriété s'appelle le **lemme de Poincaré**³.

Exercice 3.2.4. Chercher un contre exemple simple à chacune des trois règles (3.2.10).

Solution :

1. soit le domaine $\mathcal{D} = \mathbb{R} \setminus \{0\}$. Sur \mathbb{R}^+ , $f(x) = 1$, et \mathbb{R}^- , $f(x) = 0$.
2. soit le domaine $\mathcal{D} = \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$. En coordonnée polaires, $\vec{u} = \frac{1}{r} \vec{u}_\theta$.
3. soit le domaine $\mathcal{D} = \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$. En coordonnée sphériques, $\vec{v} = \frac{1}{r^2} \vec{u}_r$.

Exercice 3.2.5. TD sur l'effet Aharanov Bohm.

3.2.4 Interprétation géométrique de l'invariance de Jauge quantique, et autres théories de Jauges (*)

Dans ce paragraphe, nous donnons une introduction à la description de l'électromagnétisme comme étant "**une théorie de Jauge**". Cette description introduite par les physiciens dans les années 1970', utilise des outils de géométrie introduits par les mathématiciens (H. Whitney, H. Hopf, Pontrjagin, Chern ...) dans les années 1930'-40', comme la notion de **fibré vectoriel** et **connexion sur un fibré vectoriel**,⁴ , que nous allons expliquer.

Cette interprétation a un aspect esthétique certain, mais aussi un gros avantage conceptuel, car cette description se généralise aux autres forces fondamentales de la nature, comme la force nucléaire, la force de gravitation. Cette description a par ailleurs permis en 1973, l'unification de la force électromagnétique avec la force nucléaire faible, dans la théorie dite "**théorie de Jauge électro- faible**", dont la vérification expérimentale a été faite en 1983, avec la découverte des bosons Z_0, Z_\pm et en 2012 avec la découverte du boson de Higgs.

De plus la description géométrique en terme de fibré vectoriel est indispensable pour décrire des phénomènes topologiques ; voir cours de Master 2 pour plus détails [Fau10a].

3. Plus précisément, la condition nécessaire et suffisante sur le domaine \mathcal{D} est que son groupe de cohomologie de De-Rham soit nul, c'est à dire $H_{DR}^0(\mathcal{D}) = 0$, ou $H_{DR}^1(\mathcal{D}) = 0, H_{DR}^2(\mathcal{D}) = 0$, pour respectivement les trois formules ci-dessus, voir [Nak03].

4. "Connection on a vector bundle" en anglais.

Nous rappelons que d'un point de vue physique, nous décrivons une particule chargée *quantique* (décrite par une fonction d'onde ψ), et un champ électromagnétique *classique*. Nous supposons que ce champ influence la particule, mais que celle-ci n'influence pas le champ⁵

3.2.4.1 Nécessité d'une description géométrique

La situation décrite plus haut est insatisfaisante pour deux raisons :

1. L'expérience de Aharonov-Bohm montre que les champs \vec{E}, \vec{B} ne suffisent pas à décrire l'effet du champ électromagnétique sur une particule quantique : il faut l'expression des potentiels \vec{A}, U .
2. Cependant, ces potentiels \vec{A}, U ne sont pas uniquement déterminés : un changement de choix de Jauge arbitraire ne change pas leur effet sur la particule quantique.

Nous allons voir qu'il peut y avoir une description unique et complète du champ électromagnétique, en utilisant une description géométrique adéquate. De la même manière que les coordonnées polaires ou cartésiennes sont des choix différents pour décrire un point dans le plan, différents choix de Jauge, décrivent les mêmes champs électromagnétiques.

3.2.4.2 Autre écriture de l'équation de Schrödinger avec la dérivée covariante

On peut écrire l'équation de Schrödinger (3.2.5), sous la forme :

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + qU\right)\psi + \left(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}\right)^2\psi = 0$$

Soit :

$$-i\hbar D_t\psi + \left(-i\hbar\vec{D}\right)^2\psi = 0,$$

avec l'opérateur appelé **dérivée covariante** :

$$D : \begin{cases} D_t = \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{qU}{\hbar}\right) \\ D_x = \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{qA_x}{\hbar}\right), \quad D_y = etc... \end{cases}$$

qui a une expression identique sur les quatre axes de l'espace-temps.

Nous allons maintenant donner une description géométrique de la dérivée covariante définie ci-dessus, qui montrera la signification du changement de Jauge.

3.2.4.3 La fonction d'onde comme une section d'un espace fibré sur l'espace-temps

La fonction d'onde $\psi(\vec{x}, t) \in \mathbb{C}$ est une fonction qui associe une valeur complexe à chaque point $m = (\vec{x}, t)$ de l'espace-temps. D'après (3.2.7), la phase de cette valeur complexe n'est pas uniquement déterminée.

5. Voir discussion à la section 3.2.5 à propos de cette hypothèse.

Cela nous amène à supposer que à chaque point m de l'espace-temps M , est associé un plan vectoriel complexe, appelé fibre F_m , identique à \mathbb{C} , mais *sans choix d'axe réel précisé*. Cependant la norme d'un point $f \in F_m$ est définie, si bien que chaque fibre a une “symétrie de rotation autour de l'origine”. Ainsi si l'on veut associer un nombre complexe $c \in \mathbb{C}$ à $f \in F_m$, il y a le choix arbitraire d'une phase à faire, comme voulu.

La fibre F_m pour chaque $m \in M$ est un plan complexe de dimension 1. Considérant, tous les points m de l'espace temps, l'ensemble de ces fibres forment **un espace fibré sur l'espace-temps**. La fonction d'onde d'une particule quantique est le choix continu d'un point $s(m) \in F_m$ dans chaque fibre : on dit que c'est une **section de l'espace fibré** (car la section “coupe” chaque fibre). Voir figure 3.2.2.

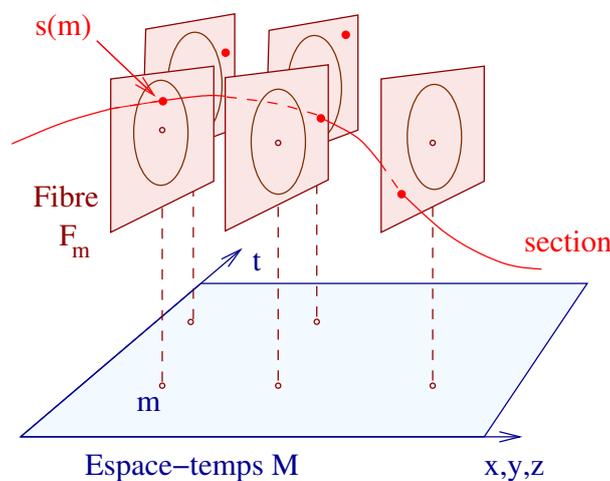


FIGURE 3.2.2 – La fonction d'onde vue comme une section d'un espace fibré sur l'espace-temps. Les cercles représentent les points de norme 1.

3.2.4.4 Le champ électromagnétique comme une connexion sur ce fibré vectoriel

L'espace fibré est l'union des fibres $F = \bigcup_m F_m$. Chaque fibre est “collée” à sa voisine (notion de continuité), mais comme nous l'avons dit il n'y a pas d'axe réel privilégié dans aucune fibre et donc pas d'identification privilégié entre un point d'une fibre et un point d'une fibre voisine, à priori.

Cependant, c'est “le rôle” du champ électromagnétique que d'identifier les fibres voisines entre elles, de les “connecter”. Nous donnons d'abord la description géométrique de cette connexion sur la figure 3.2.3, puis nous verrons comment l'exprimer en formules mathématiques plus loin.

Si m et $m + \delta m$ sont deux points infiniment proches de l'espace temps (distants par un vecteur tangent “infinitésimal” noté δm), chaque point de la fibre F_m est connecté à un point de la fibre $F_{m+\delta m}$. Cette connexion préserve la norme, et l'invariance par rotation

dans chaque fibre⁶. On suppose que cette connexion existe entre m et $m + \delta m$ pour tout point m de l'espace-temps et tout déplacement infinitésimal δm .

Affirmation : *la section $s(m)$ et la connexion sont les seuls objets géométriques nécessaires pour décrire la particule quantique et le champ électromagnétique interagissant avec elle.*

Nous allons maintenant justifier cette affirmation en retrouvant les expressions habituelles de l'électromagnétisme à partir de ces seuls objets.

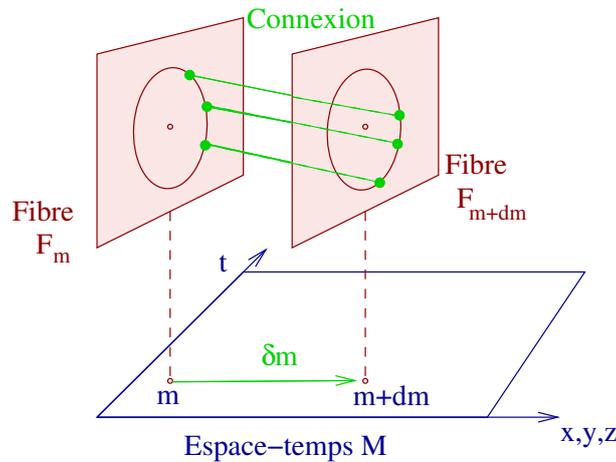


FIGURE 3.2.3 – Le champ électromagnétique est représenté par une connexion qui connecte la fibre F_m à chaque fibre voisine $F_{m+\delta m}$.

3.2.4.5 Signification géométrique de la dérivée covariante \mathcal{D} et courbure de la connexion

À partir de ces deux objets géométriques (section et connexion) voyons ce que l'on peut dire. En un point donné $m \in M$ de l'espace-temps, et pour un déplacement δm donné, on peut comparer la section et la connexion. Plus précisément, voir comment la section s'écarte de la connexion. Voir figure 3.2.4. Cet écart est un vecteur de la fibre F_m , et noté :

$$\mathcal{D}_{\delta m} s \in F_m$$

et appelé **dérivée covariante de la section selon le vecteur δm** .

Par ailleurs considérons deux vecteurs tangents de l'espace temps $\delta m_1, \delta m_2$, et le petit parcourt qu'ils définissent, partant du point m . Si l'on part d'un point de la fibre $f \in F_m$, et que l'on passe d'une fibre à une autre, au dessus de ce parcourt, en suivant la connexion,

6. On dit alors que cette connexion a le groupe de symétrie $U(1)$ (qui est précisément le groupe des transformations de \mathbb{C} préservant la norme).

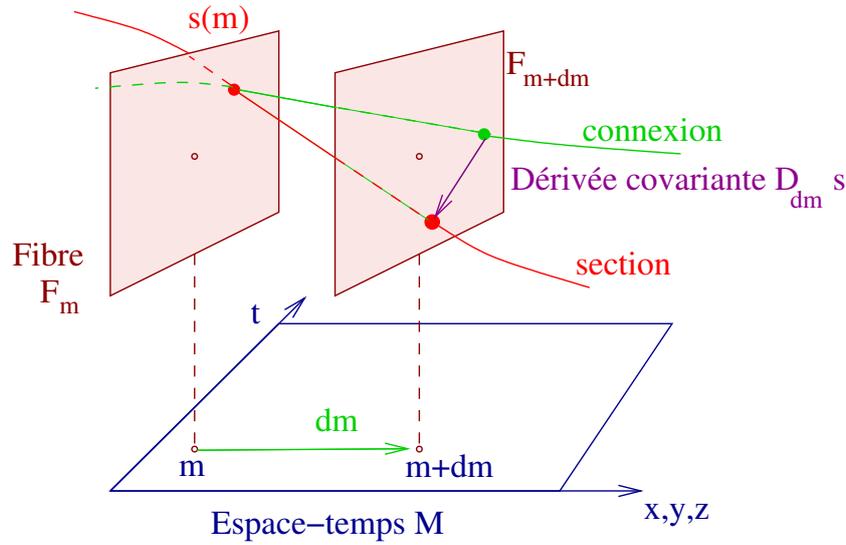


FIGURE 3.2.4 – La dérivée covariante exprime l'écart entre la section et la connexion (ou transport parallèle)

on revient à la fibre de départ F_m , mais en un autre point f^* . L'écart obtenu, appelé **holonomie du parcours** est une phase infinitésimale $\exp(i\delta\varphi)$ que l'on note :

$$\delta\varphi = \mathcal{F}_{(\delta m_1, \delta m_2)}(m)$$

Le nombre réel $\mathcal{F}_{(\delta m_1, \delta m_2)}(m)$ est appelé **courbure de la connexion au point m , selon les directions $\delta m_1, \delta m_2$** .

Remarques :

- $\mathcal{F}_{(\delta m_2, \delta m_1)} = -\mathcal{F}_{(\delta m_1, \delta m_2)}$, montrant que \mathcal{F} est antisymétrique (c'est un champ de tenseurs de rang 2 anti-symétrique, ou 2-forme).⁷
- Remarquons aussi pour une généralisation future à d'autres théories de Jauge, que le changement de phase $\exp(i\delta\varphi)$ est la seule transformation autorisée dans la fibre F_m qui préserve la norme. On dit que \mathcal{F} est un générateur (élément de l'algèbre de Lie) du groupe $U(1)$.

3.2.4.6 On retrouve les expressions habituelles de l'électromagnétisme et l'invariance de Jauge

On a décrit la dérivée covariante et la courbure sur un schéma de façon précise mais géométrique. Pour faire des calculs, il nous faut des expression numériques, et pour cela il faut faire le choix de coordonnées dans chacune des fibre.

7. Rappelons qu'un **tenseur contravariant de rang k** est un objet géométrique en un point m de l'espace-temps qui s'applique sur k vecteurs tangents linéairement et renvoie un nombre. Un tenseur contravariant antisymétrique de rang k est aussi appelé une **k -forme**.

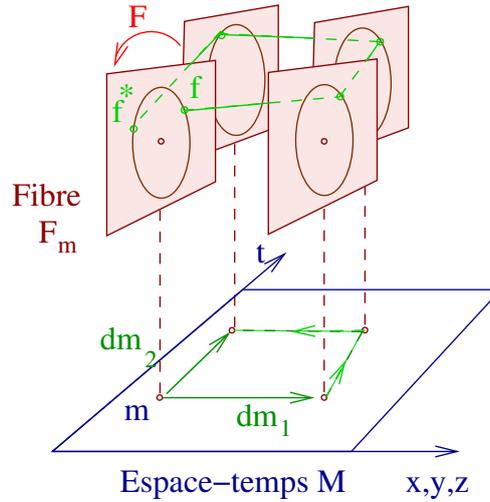


FIGURE 3.2.5 – La courbure \mathcal{F} exprime la différence de phase obtenue après avoir suivi la connexion au-dessus d'une petite boucle de l'espace-temps.

Le **choix d'une Jauge** (aussi appelé **trivialisation du fibré**) est le choix d'un axe réel de référence dans chacune des fibre F_m . Ce choix est arbitraire, il n'a pas de signification physique, mais permet d'exprimer les objets géométriques précédents. (Comme le choix d'axes gradués sur le plan permet de repérer les points par des coordonnées). Dans chaque fibre F_m , le choix de Jauge revient donc à associer le nombre 1 à un point arbitraire (de module 1) $r(m)$, appelé **section unitaire de référence**.

La fonction d'onde ψ : Par rapport à la section de référence $r(m)$, la valeur de la section $s(m)$ est caractérisée par le nombre complexe $\psi(m) \in \mathbb{C}$ en écrivant :

$$s(m) = \psi(m) r(m).$$

La section s est donc caractérisée par la **fonction d'onde complexe** $\psi(m)$.

Le potentiel électromagnétique \mathcal{A} : En un point donné $m \in M$, et pour un vecteur tangent δm donné, l'écart que fait la section de référence r avec la connexion s'exprime par la dérivée covariante $(\mathcal{D}_{\delta m} r)(m) \in F_m$. Comme $r(m)$ est de module 1, et que la connexion conserve la norme (sur la figure, $r(m)$ et $\mathcal{D}_{\delta m} r$ forment un angle droit dans la fibre, traduisant la multiplication par i), cet écart s'exprime donc comme

$$(\mathcal{D}_{\delta m} r)(m) = (i\mathcal{A}_{\delta m}) r(m) \quad (3.2.11)$$

où $\mathcal{A}_{\delta m}$ est un nombre réel (i.e. \mathcal{A} est un tenseur de rang 1, ou 1-forme). Voir figure 3.2.6.

La dérivée covariante : L'écart de la section s par rapport à la section de référence, selon la direction δm est $ds_{\delta m} = (d\psi)_{\delta m} r$. Noter que cet écart dépend du choix de r et n'a

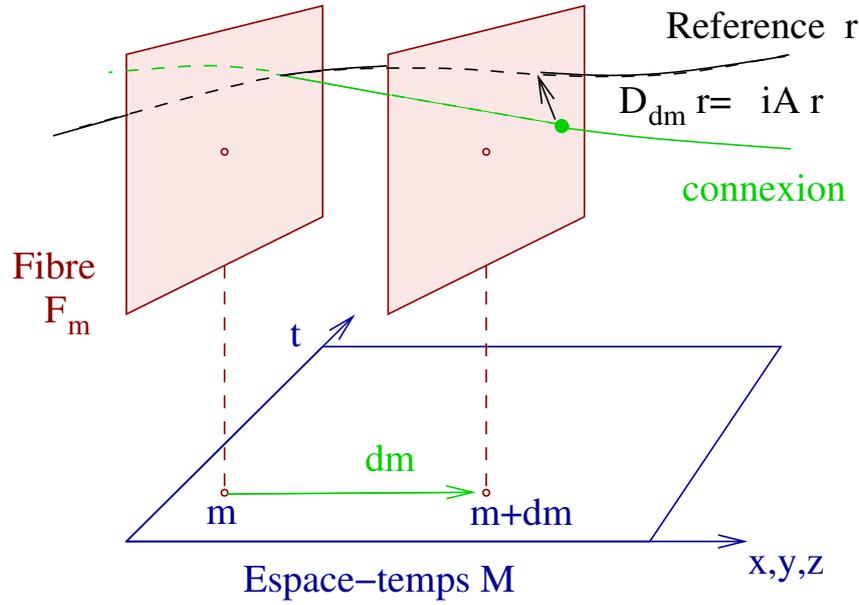


FIGURE 3.2.6 – Le potentiel électromagnétique \mathcal{A} exprime comment la section de référence r s'écarte du transport parallèle (ou connexion).

donc pas de signification physique. Mais en utilisant cette section de référence, la dérivée covariante se décompose en deux termes, d'après⁸ la figure 3.2.7 :

$$\mathcal{D}_{\delta m} s = \mathcal{D}_{\delta m} (\psi r) = ((d\psi)_{\delta m} + i\mathcal{A}_{\delta m} \psi(m)) r$$

Chacun de ces deux termes dépend du choix de r mais la somme n'en dépend pas.

Ainsi en prenant pour δm tour à tour les quatre vecteurs tangents $\delta m = \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}, \frac{\partial}{\partial t}$, d'un référentiel donné, la dérivée covariante s'écrit

$$\mathcal{D}_{\partial/\partial x} s = \left(\underbrace{(d\psi)_{\partial/\partial x} + i\mathcal{A}_{\partial/\partial x} \psi}_{D_x \psi} \right) r$$

avec la dérivée covariante de la fonction d'onde (déjà introduite plus haut) :

$$D_x \psi = (d\psi)_{\partial/\partial x} + i\mathcal{A}_{\partial/\partial x} \psi = \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{qA_x}{\hbar} \right) \psi$$

à condition de poser :

$$\mathcal{A}_{\partial/\partial x} = -\frac{qA_x}{\hbar}, \quad \mathcal{A}_{\partial/\partial y} = -\frac{qA_y}{\hbar}, \quad \mathcal{A}_{\partial/\partial z} = -\frac{qA_z}{\hbar}, \quad \mathcal{A}_{\partial/\partial t} = \frac{qU}{\hbar},$$

(on fait de même pour D_y, D_z, D_t).

8. Cette relation s'écrit aussi $\mathcal{D}(\psi r) = (d\psi) r + \psi \mathcal{D}(r)$, et s'appelle **la règle de Leibnitz**. Elle sert de définition à la dérivée covariante dans les ouvrages de géométrie.

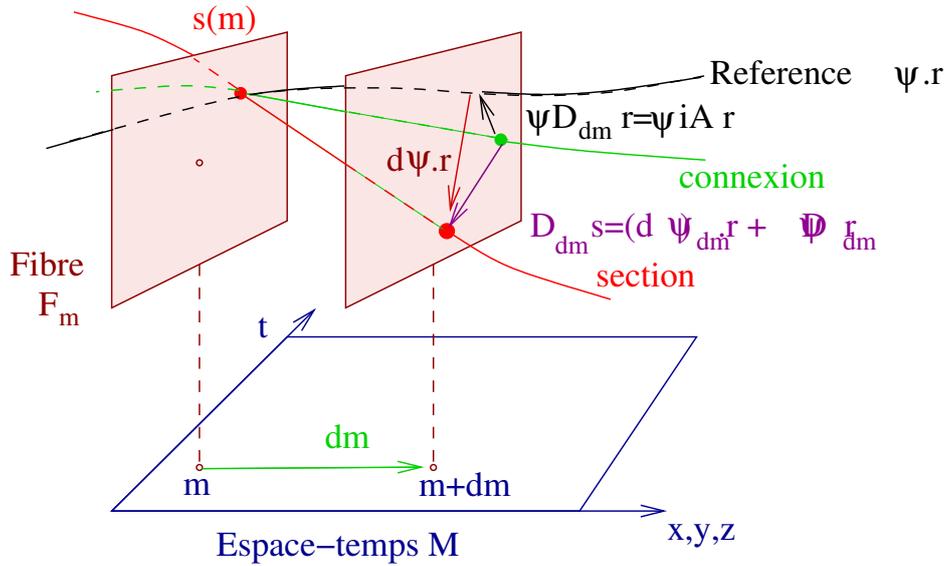


FIGURE 3.2.7 – Décomposition de la dérivée covariante, en utilisant la section de référence $\psi_m r$ (ici ψ_m est une constante).

Le tenseur électromagnétique et la courbure \mathcal{F} : Montrons que la courbure \mathcal{F} définie ci-dessus s'identifie avec le tenseur électromagnétique F de l'électromagnétisme. Considérons l'exemple où l'on choisit les deux vecteurs déplacements selon des axes du référentiel : $\delta m_1 = \partial/\partial x$ et $\delta m_2 = \partial/\partial y$. On calcule :

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{(\partial/\partial x, \partial/\partial y)} &= i(\partial_x \mathcal{A}_y - \partial_y \mathcal{A}_x) r \\ &= -\frac{iq}{\hbar} F_{x,y} r\end{aligned}$$

avec le tenseur électromagnétique $F_{x,y} = (\partial_x \mathcal{A}_y - \partial_y \mathcal{A}_x)$ etc.. pour les autres composantes.

Démonstration. D'après la figure

$$\mathcal{F}_{(\partial/\partial x, \partial/\partial y)} = \mathcal{D}_x \mathcal{D}_y r - \mathcal{D}_y \mathcal{D}_x r$$

or d'après la règle de Leibnitz

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_x \mathcal{D}_y r &= \mathcal{D}_x (i \mathcal{A}_y r) = i(\partial_x \mathcal{A}_y) r + i \mathcal{A}_y (\mathcal{D}_x r) \\ &= i(\partial_x \mathcal{A}_y) r + i \mathcal{A}_y i \mathcal{A}_x r\end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{(\partial/\partial x, \partial/\partial y)} &= \mathcal{D}_x \mathcal{D}_y r - \mathcal{D}_y \mathcal{D}_x r \\ &= i(\partial_x \mathcal{A}_y - \partial_y \mathcal{A}_x) r\end{aligned}$$

□

Effet d'un changement de Jauge : Si on change de choix de section de référence en posant

$$r'(m) = e^{-iq\chi(m)/\hbar} r(m)$$

avec $m \rightarrow \chi(m)$ fonction réelle, alors par définition on doit écrire

$$s(m) = \psi(m)r(m) = \psi'(m)r'(m) = \psi'(m)e^{-iq\chi(m)/\hbar} r(m)$$

la valeur de $\psi'(m)$ est donc changée par une phase :

$$\psi'(m) = e^{i\frac{q\chi(m)}{\hbar}} \psi(m)$$

comme sur la relation (3.2.7). De même la valeur de $\mathcal{A} = \frac{q}{\hbar} (-\vec{A}, U)$ change selon :

$$\vec{A}' = \vec{A} + \text{grad}\chi, \quad U' = U - \partial_t\chi$$

comme les formules de transformation de Jauge (3.2.3).

Démonstration. Utilisant la règle de Leibnitz

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_x r' &= (\mathcal{D}_x (e^{-iq\chi/\hbar} r)) \\ &= \partial_x (e^{-iq\chi/\hbar} r) + e^{-iq\chi/\hbar} \mathcal{D}_x r \\ &= -\frac{iq}{\hbar} (\partial_x \chi) e^{-iq\chi/\hbar} r + e^{-iq\chi/\hbar} i\mathcal{A}_x r \\ &= i \left(-\frac{q}{\hbar} (\partial_x \chi) + \mathcal{A}_x \right) e^{-iq\chi/\hbar} r \end{aligned}$$

Par ailleurs

$$\mathcal{D}_x r' = i\mathcal{A}'_x r' = i\mathcal{A}'_x r' = i\mathcal{A}'_x e^{-iq\chi/\hbar} r$$

Par identification on déduit

$$\mathcal{A}'_x = \mathcal{A}_x - \frac{q}{\hbar} (\partial_x \chi)$$

donnant

$$A'_x = A_x + \partial_x \chi$$

etc... pour les autres composantes y, z, t soit

$$\vec{A}' = \vec{A} + \text{grad}\chi, \quad U' = U - \partial_t\chi$$

□

Résumé

- En théorie de Jauge de l'électromagnétisme, la particule quantique est une section d'un fibré vectoriel sur l'espace-temps.
- Le champ électromagnétique est décrit par une connexion de ce fibré. La courbure du fibré qui représente l'holonomie infinitésimale exprime la présence de champs électrique et magnétique (c'est le tenseur $F_{\mu\nu}$).
- L'équation d'évolution de Schrödinger fait intervenir la dérivée covariante qui exprime l'écart que fait la section avec la connexion du fibré.
- Un choix de Jauge est le choix d'un repère dans chacune des fibres, et permet d'obtenir des expressions en terme de fonction numériques (et champs de tenseur). Mais ces expressions dépendent de ce choix.

3.2.4.7 Généralisation : Théories de Jauge de Yang-Mills

Il est facile de généraliser la description précédente en considérant d'autres espace fibrés vectoriels de dimension plus grande. Cette simple généralisation permet de décrire les autres théories de Jauges de la nature que sont la **force électro-faible** (force électromagnétique et **force nucléaire faible**) et la **force nucléaire forte**, aussi appelée théorie de la **Chromo-dynamique**. La force électro-faible nécessite la notion de Champs de Higgs, et la brisure spontanée de symétrie. Pour simplifier, nous esquisserons ici seulement la Chromo-Dynamique.

La théorie de la Chromodynamique permet de décrire **les quarks** (qui sont les champs quantiques de matière ; leur fonction d'onde sera la section d'un fibré) qui subissent l'effet d'un champ de Jauge qui est **le champ de gluons** (ce sera la connexion du fibré). Tous ces objets là se trouvent dans les noyaux nucléaires, les protons et les neutrons et forment l'essentiel de ceux ci.

Dans la théorie de Jauge Chromo-dynamique chaque fibre F_m est maintenant un espace de dimension complexe 3. Ainsi **chaque fibre est isomorphe à \mathbb{C}^3** , mais il n'y a pas de repère privilégié, et donc une invariance par les rotations dans \mathbb{C}^3 qui sont représentées justement par **le groupe $SU(3)$** (matrices 3×3 complexes unitaires de déterminant 1, voir [Fau10b]).

On peut reprendre la description précédente sans difficulté (les formules sont les mêmes) et voici les modifications majeures :

- Une section de référence (ou choix de Jauge) $r(m) \in F_m$ est maintenant un repère avec trois vecteurs de base, appelés **Rouge-Vert-Bleu** (par analogie lointaine avec la perception de la lumière par les humains possédant trois types de récepteurs). Chaque fibre F_m de dimension 3 est appelée "**espace des couleurs**".
- Une section du fibré est une fonction d'onde de quarks. Par rapport à une section de référence (choix de Jauge) cette section est représentée par 3 fonctions d'ondes ($\psi_{Rouge}, \psi_{Vert}, \psi_{Bleu}$) appelées **les trois couleurs des quarks**. (Bien sûr, un autre choix de Jauge mélange ces couleurs, qui sont donc arbitraires.)
- La courbure de la connexion \mathcal{F} est une rotation infinitésimale dans la fibre F_m de dimension 3 ; par conséquent cette courbure est un générateur du groupe $SU(3)$.

Comme ce groupe est de dimension 8 cela signifie que exprimé par rapport à une section de référence, la courbure \mathcal{F} est un champ à 8 composantes. Ce sont les **8 champs de gluons** possibles⁹. Attention que ces 8 composantes dépendent du choix de Jauge.

- L'équation de Schrödinger s'écrira de la même manière, en faisant intervenir la dérivée covariante.

En fait, pour que la théorie de la Chromo-dynamique ait une utilité par rapport aux expériences, il est nécessaire d'apporter deux améliorations par rapport à la description donnée ici :

1. Considérer la **version relativiste**. En effet les quarks sont "légers" ($m_q c^2 \simeq 5$ MeV) et toujours en régime ultra-relativiste dans le noyaux nucléaire. L'essentielle de leur énergie E est sous forme d'énergie cinétique E_c . Un proton au repos (ou un neutron) étant constitué de trois quarks, son énergie est l'énergie totale de ces quarks et d'après $E = m_p c^2 = 934\text{MeV}$ la masse (virtuelle) du proton provient essentiellement de l'énergie cinétique des trois quarks (u,u,d) (ou (u,d,d) pour le neutron) et des gluons. La matière ordinaire de notre monde de tous les jours est donc "virtuelle" et faite d'énergie cinétique en quasi-totalité.
2. Les quarks influencent les gluons, et il est donc important de **quantifier le champ de gluons** (d'après une remarque de la section suivante. Cela consiste à quantifier la connexion...ce qui n'est pas une chose aisée. De nombreux physiciens et mathématiciens cherchent encore une formulation élégante et géométrique de cela. Lire l'article de E. Witten 2007 (disponible sur la page web [Faua]). La résolution de ce problème n'est pas connue et est considérée à ce jour comme un des plus grand défis pour la physique et les mathématiques. (ref : wikipedia).

9. **Exercice de mathématique** : Plus généralement, montrer que le groupe de matrice $SU(n)$ agissant dans \mathbb{C}^n est de dimension $n^2 - 1$. Ainsi $\dim(SU(3)) = 9 - 1 = 8$.

Solution :

Si l'on écrit une matrice $n \times n$, $M \in SU(n)$ sous la forme $M = e^{iG}$ (on appelle G le générateur), alors la contrainte M unitaire s'écrit

$$M^+ = M^{-1} \Leftrightarrow e^{-iG^+} = e^{-iG} \Leftrightarrow G^+ = G$$

et la contrainte que $\det(M) = 1$ s'écrit

$$\det(M) = e^{i\text{Tr}(G)} = 1 \Leftrightarrow \text{Tr}(G) = 0$$

Par conséquent il suffit de compter la dimension des matrices G hermitiques ($\overline{G_{ji}} = G_{ij}$) et de trace nulle ($\sum_i G_{ii} = 0$). Pour une telle matrice il y a $n(n-1)/2$ éléments complexes indépendants G_{ij} hors de la diagonale $i \neq j$, soit $n(n-1)$ variables réelles, et n éléments réels G_{ii} indépendants sur la diagonale moins la contrainte de trace nulle, soit

$$\dim(SU(n)) = n(n-1) + n - 1 = n^2 - 1$$

3.2.5 Remarque importante sur la nécessité d'une théorie quantique du champ électromagnétique

Le Hamiltonien (3.2.4) décrit la dynamique d'une particule *quantique sous l'influence* d'un champ électromagnétique *classique* dit extérieur. Il est très important de comprendre qu'il n'est pas possible de décrire l'action inverse i.e. l'influence de la particule quantique sur le champ classique, bien que cette influence réciproque est bien présente dans la nature. Nous allons montrer que pour le faire il est *nécessaire de considérer le champ électromagnétique comme quantique*.

Ceci est très général : on peut parfaitement avoir un modèle physique cohérent décrivant l'influence d'un sous système classique sur un sous-système quantique, mais pas l'inverse. On peut bien sûr avoir un modèle cohérent décrivant l'interaction entre deux systèmes classiques (par exemple l'électrodynamique classique, qui décrit un champ classique avec des particules chargées classiques), ou entre deux systèmes quantiques. L'exemple suivant explique simplement pourquoi.

En électrodynamique classique, un électron accéléré émet une onde électromagnétique (rayonnement), issue du lieu x où l'électron est présent.

Si maintenant, cet électron est une fonction d'onde quantique localisée en x_1 (toujours accéléré) notée $|x_1\rangle$ on s'attend à ce qu'il émette une onde électromagnétique issue de x_1 notée $|em_1\rangle$, le résultat serait alors $|x_1\rangle \otimes |em_1\rangle$. De même si l'électron est en $|x_2\rangle$, on obtient $|x_2\rangle \otimes |em_2\rangle$. Mais la mécanique quantique de l'électron permet un état superposé comme $|\psi\rangle = |x_1\rangle + |x_2\rangle$, (où l'onde de l'électron est dé-localisée) et qui d'après le principe de superposition, devrait donner :

$$|\text{etat final}\rangle = |x_1\rangle \otimes |em_1\rangle + |x_2\rangle \otimes |em_2\rangle$$

c'est à dire une superposition de deux ondes électromagnétique, ce qui ne rentre pas dans le cadre de l'électromagnétisme classique, mais nécessite bien une description quantique.

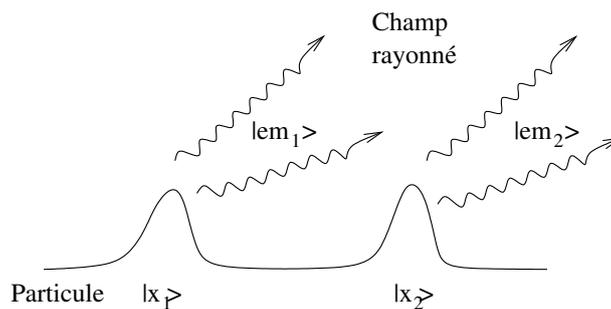


FIGURE 3.2.8 – Schéma montrant l'état $|\text{etat final}\rangle = |x_1\rangle \otimes |em_1\rangle + |x_2\rangle \otimes |em_2\rangle$.

Cela est relié à une importante problématique qui date depuis les années 1920 et encore actuelle qui est de rechercher la **théorie quantique de la gravitation**. C'est la même situation que précédente, avec le champ de gravitation remplaçant le champ électromagnétique. En effet la théorie d'Einstein de la relativité générale est une théorie classique,

qui décrit la dynamique du champ de gravitation classique (plus précisément le champ métrique de l'espace-temps). Dans cette théorie classique, le champ de gravitation influence la matière et inversement la matière influence le champ de gravitation. Par exemple le Soleil émet un champ gravitationnel que ressent la Terre et détermine sa trajectoire circulaire autour du Soleil. Mais la théorie quantique apparue dans les mêmes années, décrit la matière comme quantique. Puisque celle-ci influence le champ de gravitation, il faut donc selon cette analyse une théorie quantique de la gravitation. La recherche d'une telle théorie est toujours d'actualité. Les efforts les plus actifs en ce moments concernent la "M-théorie" et la "théorie des cordes". Ref : http://www.damtp.cam.ac.uk/user/gr/public/qg_ss.html.

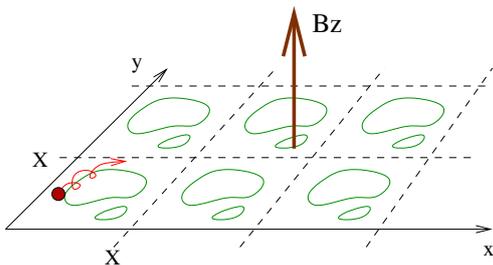
Peut être que ces arguments sont trop naïfs, et que la physique connaîtra un plus grand bouleversement pour résoudre ces questions.

3.3 (*) Niveaux de Landau et spectre fractal de Hofstadter

Dans l'exercice suivant, on propose d'étudier des électrons bidimensionnels dans un champ magnétique constant, avec un potentiel périodique.

- Sans potentiel, le spectre est simple : ce sont les **niveaux de Landau**.
- Avec le potentiel périodique, le spectre est fractal et a été étudié dans *D. Hofstadter, "Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields" Phys.Rev.B 14,2239, (1976)*. Il est (partiellement) observé expérimentalement dans : *Albrecht et al. "Evidence of the Hofstadter Fractal energy spectrum in the Quantized Hall Conductance " Phys.Rev.Lett. 86,147 (2001)*. Chercher "hofstadter butterfly" dans Google.

Exercice 3.3.1. On considère des électrons libres, confinés dans un plan (x, y) (entre deux couches de semi-conducteurs). On impose un fort champ magnétique transverse, constant et uniforme $\vec{B} = B \vec{e}_z$, $B = 0.21 \text{ Tesla}$. On suppose les électrons indépendants.



De plus on suppose que dans ce plan, les électrons subissent un potentiel périodique $V(x, y)$ de période $X = 0, 2\mu m$, (respectivement en x, y), qui est créé par des grilles électrostatiques artificielles.

1. Montrer que $\vec{A} = (A_x = -\frac{1}{2}By, A_y = \frac{1}{2}Bx, A_z = 0)$ est une expression possible pour le potentiel vecteur. Écrire le Hamiltonien $\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p} - e\vec{A})^2 + V(\hat{x}, \hat{y})$ décri-

vant la dynamique d'un électron, à partir des opérateurs $(\hat{x}, \hat{p}_x, \hat{y}, \hat{p}_y)$, (sans développer).

- (a) On propose d'effectuer le changement de variables suivant $(\hat{x}, \hat{p}_x, \hat{y}, \hat{p}_y) \rightarrow (\hat{Q}, \hat{P}, \hat{q}, \hat{p})$:

$$\begin{cases} Q = \frac{1}{\sqrt{\hbar e B}} \left(p_x + \frac{eB}{2} y \right) \\ P = \frac{1}{\sqrt{\hbar e B}} \left(p_y - \frac{eB}{2} x \right) \end{cases} \quad \begin{cases} q = \frac{1}{eBX} \left(p_x - \frac{eB}{2} y \right) \\ p = -\frac{1}{eBX} \left(p_y + \frac{eB}{2} x \right) \end{cases},$$

Quelles sont les unités physiques de $(\hat{Q}, \hat{P}, \hat{q}, \hat{p})$? Calculer les commutateurs des opérateurs $(\hat{Q}, \hat{P}, \hat{q}, \hat{p})$ deux à deux, pour vérifier que ce sont bien des variables canoniques ? On introduira une "constante de Planck effective"

$$\hbar_{eff} = \frac{\hbar}{eBX^2}$$

Exprimer \hbar_{eff} à partir du flux $\phi = BX^2$ de B à travers la surface élémentaire X^2 et du "quantum de flux" ou **fluxon** $\phi_0 = h/e$?

- (b) En introduisant la fréquence cyclotron $\omega = eB/m$, donner l'expression de \hat{H} en fonction des nouveaux opérateurs $(\hat{Q}, \hat{P}, \hat{q}, \hat{p})$, $(\hbar\omega)$, X et \hbar_{eff} ?
- (c) Dans le cas d'un potentiel nul, $V = 0$, donner l'expression des niveaux d'énergie E_n de \hat{H} , appelés **niveaux de Landau**, et donner leur multiplicité. Interprétation ?
- (d) Dans le cas V quelconque, remarquer que H est périodique par rapport aux variables (q, p) . Donner l'expression des opérateurs de translations \hat{T}_q, \hat{T}_p qui correspondent à cette périodicité et qui commutent donc avec \hat{H} (Attention à ne pas confondre \hbar_{eff} et \hbar).
- (e) En utilisant la relation de Glauber ($e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{[\hat{A}, \hat{B}]} e^{\hat{B}} e^{\hat{A}}$ valable si $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$), exprimer $\hat{T}_q \hat{T}_p$ à partir de $\hat{T}_p \hat{T}_q$? Dédire que l'on a $[\hat{T}_q, \hat{T}_p] = 0$ si et seulement si

$$\frac{1}{2\pi\hbar_{eff}} = N \in \mathbb{N} \quad : \text{entier} \quad (3.3.1)$$

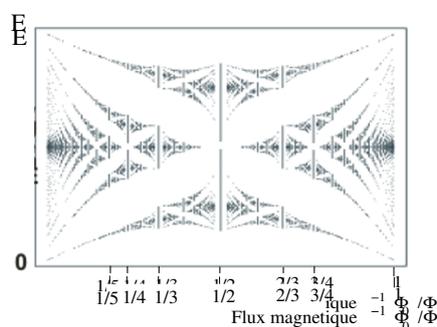
Traduire cette condition en terme du flux $\phi = BX^2$ de B à travers la surface élémentaire X^2 , par rapport au quantum de flux $\phi_0 = h/e$?

Application numérique : que vaut N pour les valeurs de $B = 0,21 \text{ Tesla}$ et $X = 0,2 \mu\text{m}$, $h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J.s.}$, $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$?

- (f) En supposant la condition (3.3.1) remplie, et en analogie avec la théorie de Bloch pour les cristaux, déduire la nature du spectre de H ?
- (g) On suppose maintenant V faible mais non nul, et on s'intéresse au premier niveau de Landau ; on supposera donc que les variables (Q, P) sont "gelées" et seuls le

degré de liberté (q, p) subsiste. D'après ci-dessus une fonction d'onde stationnaire $\psi(q)$ est 1-périodique et sa transformée de Fourier $\tilde{\psi}(p)$ est aussi 1-périodique. Montrer que l'espace de ces fonctions est de dimension N . Que devient donc le premier niveau de Landau sous l'effet de la perturbation de V ?

- (h) Une variation continue de la valeur du flux ϕ implique une variation continue de la valeur de $1/(2\pi\hbar_{eff})$ (parmi les nombres réels). En utilisant le fait que tout nombre réel s'approche par un rationnel $a/b \in \mathbb{Q}$, montrer comment on peut se ramener à la condition (3.3.1), étudiée ci-dessus (Aide : il faut considérer une cellule élémentaire différente). Discuter alors l'allure fractale du spectre du premier niveau de Landau, obtenu numériquement sur la figure ci-dessous, appelée **papillon de Hofstadter**¹⁰ (pour $V(x, y) = Cste(\cos(x/X) + \cos(y/X))$).



3.4 Conseils de Lecture

- Sur l'invariance de Jauge : Cohen-Tannoudji [CBF], complément H_{III} .
- Niveaux de Landau : Cohen-Tannoudji [CBF], complément E_{VI} .
- Effet Aharanov-Bohm : Sakurai [J.J85], chapitre 2.6.
- Documents sur la page web du cours (Article de Witten).

Pour approfondir :

- L'aspect géométrique de l'électromagnétisme et des théorie de Jauge :
 - Nakahara [Nak03].
 - Notes de cours de M2. [Fau10a]

10. Ce spectre a été étudié dans *D. Hofstadter, "Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields" Phys.Rev.B 14,2239, (1976)*. Il est (partiellement) observé expérimentalement dans : *Albrecht et al. "Evidence of the Hofstadter Fractal energy spectrum in the Quantized Hall Conductance" Phys.Rev.Lett. 86,147 (2001)*. Chercher "hofstadter butterfly" dans Google.