

UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES
EL JADIDA

**Groupe de Physique Théorique
Laboratoire de Physique de la Matière Condensée**

**Filière
Sciences de la Matière Physique
–SMP4–**

AHMED JELLAL¹

Cours

MECANIQUE QUANTIQUE 1

QUANTUM MECHANICS: A fundamental theory of matter and energy that explains facts, which previous physical theories were unable to account for. In particular the fact that energy is absorbed and released in small, discrete quantities (quanta), and that all matter displays both wavelike and particlelike properties, especially when viewed at atomic and subatomic scales. Quantum mechanics suggests that the behavior of matter and energy is inherently probabilistic and that the effect of the observer on the physical system being observed must be understood as a part of that system. Also called quantum physics, quantum theory.

¹jellal.ucd@gmail.com

Contents

1	PRINCIPES DE LA MECHANIQUE CLASSIQUE	1
1.1	INTRODUCTION	1
1.2	PARTICULE PONCTUELLE	2
1.3	MECANIQUE LAGRANGIENNE	2
1.3.1	Définition	2
1.3.2	Principe de la moindre ation	3
1.3.3	Moment généralisé	5
1.4	Mécanique de Hamilton	5
1.4.1	Introduction et définitions	5
1.4.2	Equation du mouvement de Hamilton	6
1.4.3	Temps d'évolution d'une grandeur physique	7
1.4.4	Crochet de Poisson	7
1.5	Ondes	8
1.6	Particule chargée dans un champ électromagnétique	9
1.6.1	Champ électromagnétique	9
1.6.2	Lagrangien d'une particule classique chargée	10
1.6.3	Hamiltonien d'une particule classique chargée	10
2	ECHEC ET QUANTIFICATION SEMI-CLASSIQUE	13
2.1	ECHEC DE LA MÉCANIQUE CLASSIQUE	13
2.2	MODÈLE DE BOHR 1913	14
2.3	DUALITÉ ONDE-CORPUSCULAIRE	16
2.4	QUANTIFICATION SEMI-CLASSIQUE	16
3	PRINCIPES DE LA MECANIQUE QUANTIQUE	19
3.1	Probabilité	19
3.2	PRINCIPE DE SUPERPOSITION LINÉAIRE	20
3.3	PAQUET D'ONDE	22
3.4	MOYENNE ET VARIATION	24
3.5	OPÉRATEURS ET MESURES	24
3.5.1	Définitions	24
3.5.2	Opérations	26
3.5.3	Equations aux valeurs propres	29
3.5.4	Produit scalaire	29
3.5.5	Opérateur adjoint	30
3.5.6	Opérateurs hermitiens	31
3.5.7	Opérateurs unitaires	32
3.5.8	Représentation matricielle	32
3.5.9	Notation de Dirac	33

3.5.10	Valeurs et vecteurs propres des opérateurs hermitiens	34
3.5.11	Opérateurs hermitiens et mesures physiques	35
3.5.12	Opérateur projection	36
3.6	Opérateur parité	37
3.7	QUANTIFICATION	37
3.7.1	Principe de correspondance	38
3.7.2	Espace \mathcal{H} des fonctions d'onde d'une particule	39
3.7.3	Opérateurs position et impulsion	44
3.8	OBSERVABLES	45
3.8.1	Définition et exemples	45
3.8.2	Observables commutantes	46
3.8.3	Principe d'incertitude de Heseinberg	48
3.9	OPERATEUR EVOLUTION	49
3.9.1	Définition	49
3.9.2	Représentation de Heisenberg	50
4	APPLICATION DE MECANIQUE QUANTIQUE	53
4.1	RAYONNEMENT DU CORPS NOIR	53
4.1.1	Introduction	53
4.1.2	Expérience	53
4.1.3	Description classique	54
4.1.4	Description quantique	55
4.2	EFFECT PHOTOÉLECTRIQUE	57
4.2.1	Expérience	57
4.2.2	Théorie	58
4.3	MARCHE DE POTENTIEL	59
4.3.1	Cas 1: $E > V_0$	60
4.3.2	Cas 2: $E < V_0$	62
4.3.3	Conclusion	63

Chapitre 1

PRINCIPES DE LA MECHANIQUE CLASSIQUE

1.1 INTRODUCTION

Les lois de Newton peuvent être reformulées de façons différentes. Ces reformulations fournissent des méthodes plus puissantes et élégantes pour résoudre les problèmes qui possèdent de nombreuses variables différentes. Dans les systèmes de coordonnées non-cartésiennes (exemple coordonnées sphériques), les formulations des vecteurs sont compliquées par le fait que les directions orthogonales associées aux variables dépendent des valeurs de coordonnées généralisées. L'avantage de ces reformulations alternatives des lois de Newton est dû au fait qu'elles contiennent des quantités scalaires plutôt que des grandeurs vectorielles. Par conséquent, elles ne nécessitent pas de transformer les équations du mouvement entre les coordonnées cartésiennes et les non-cartésiennes.

Il est utile de rappeler certaines notions de la mécanique classique. Pour cela, on considère trois théories classiques, il s'agit de la mécanique de

- Newton
- Lagrange
- Hamilton

■ Pour une particule ponctuelle on va introduire les notions:

- Position
- Vitesse
- Trajectoire
- Quantité de mouvement
- Energie

■ Pour une onde, on va voir les notions:

- Forme
- Longueur d'onde
- Pulsation

- Fréquence
- Période
- Intensité

1.2 PARTICULE PONCTUELLE

En physique classique, une particule ponctuelle qui se déplace dans \mathbb{R}^3 est caractérisée à chaque instant t par deux vecteurs: sa position \vec{r} et sa vitesse \vec{v} . Dans le Système International de mesure (SI), la position se mesure en mètre m et la vitesse en mètre par seconde m/s.

- Si $\vec{r}(t)$ est une fonction continue et dérivable par rapport au temps, la relation mathématique reliant \vec{r} et \vec{v} s'écrit comme

$$\frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \vec{v}(t). \quad (1.1)$$

L'ensemble des points $\vec{r}(t)$ dans l'espace, formant une courbe paramétrisée par le temps, s'appelle la trajectoire de la particule considérée.

- Si on connaît la position et la vitesse de la particule à l'instant $t = 0$ ainsi que la force \vec{F} à laquelle la particule est soumise et sa masse m , on peut déterminer la trajectoire de la particule en résolvant l'équation de Newton (principe fondamental de la dynamique):

$$m\vec{\gamma} = m \frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} = \vec{F}(t) \quad (1.2)$$

où $\vec{\gamma}$ est l'accélération. La masse m se mesure en kilogrammes kg, et la force \vec{F} en Newton N, avec $1\text{N} = 1\text{kgms}^{-2}$. Notons que la solution $\vec{r}(t)$ de l'équation de Newton (1.2) donne accès à des positions et à des vitesses $\vec{v}(t)$ de la particule à tout instant t .

- Souvent on utilise la quantité de mouvement \vec{p} de la particule au lieu sa vitesse \vec{v} . Elle est donnée par

$$\vec{p} = m\vec{v} \quad (1.3)$$

et joue le rôle de différencier entre les particules qui se déplacent avec la même vitesse mais ayons des masses différentes.

Note 1:

1. En physique classique on peut attribuer à la particule à chaque instant une position $\vec{r}(t)$ et une vitesse $\vec{v}(t)$.
2. Pour une particule donnée soumise à une force, les conditions initiales $\vec{r}(0)$ et $\vec{v}(0)$ déterminent complètement son évolution à des instants successifs. Pour cela, on dit qu'en physique classique il y a le "déterminisme".

1.3 MECANIQUE LAGRANGIENNE

1.3.1 Définition

L'approche de Lagrange pour la mécanique classique est basée sur une quantité scalaire, dite le Lagrangien L , qui dépend des coordonnées généralisées et ses vitesses.

- Pour un système de coordonnées cartésiennes, les coordonnées sont la position de la particule (x, y, z) et ses vitesses généralisées sont les dérivées temporelles des coordonnées, représentées par $(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$.
- Pour un système de coordonnées non-cartésiennes, par exemple les coordonnées sphériques, les coordonnées généralisées pour une particule sont (r, θ, φ) et ses vitesses généralisées sont les dérivées temporelles des coordonnées $(\dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\varphi})$.

Par définition le Lagrangien est donné par la différence entre l'énergie cinétique T et l'énergie potentielle V :

$$L = T - V. \quad (1.4)$$

En coordonnées cartésiennes, on a

$$L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 + \frac{m}{2}\dot{y}^2 + \frac{m}{2}\dot{z}^2 - V(x, y, z) \quad (1.5)$$

qui peut s'écrire en coordonnées sphériques comme

$$L = \frac{m}{2}\dot{r}^2 + \frac{m}{2}r^2\dot{\theta}^2 + \frac{m}{2}r^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2 - V(r, \theta, \varphi). \quad (1.6)$$

Note 2:

1. Pour un problème de N particules, on note les coordonnées généralisées par q_i , où $i = 1, 2, \dots, 3N$ correspondant aux 3 coordonnées pour chacune de N particules et ses vitesses généralisées par \dot{q}_i .
2. Le Lagrangien total est une fonction de l'ensemble (q_i, \dot{q}_i) , noté par $L(q_i, \dot{q}_i)$, qui est donc la somme de l'énergie cinétique des particules moins l'énergie potentielle totale. Celle-ci est également la somme des potentiels externes agissant sur chacune de ces particules ainsi que la somme de toute potentiels d'interaction agissant entre les paires de particules.

1.3.2 Principe de la moindre ation

Les équations du mouvement proviennent d'un principe extremum, souvent appelé le principe de moindre action. La quantité centrale dans ce principe est donnée par la l'action S qui est un nombre dépendant de la fonction spécifique $q_i(t')$, c'est la trajectoire. Ces trajectoires passent par la position initiale $q_i(0)$ jusqu'à la position finale $q_i(t)$. Ces deux ensembles de valeurs sont supposés connus, et ils remplacent les deux ensembles de conditions initiales, $q_i(0)$ et $\dot{q}_i(0)$, utilisés dans la solution des lois de Newton. Il existe une infinité de trajectoires arbitraires qui courent entre la position initiale et la position finale. L'action de l'une de ces trajectoires, $q_i(t')$, est donnée par un nombre ayant la valeur de l'intégration

$$S = \int_0^t dt' L(q_i(t'), \dot{q}_i(t')). \quad (1.7)$$

La valeur de S dépend du choix particulier de la trajectoire $q_i(t')$. Le principe d'extremum affirme que la valeur de S est un extremum, i.e. un maximum, minimum ou point de selle, pour la trajectoire qui satisfait les lois de Newton.

Pour élucider le sens du principe extremum, nous allons considérer une trajectoire arbitraire $q(t')$ qui passe entre la position initiale et finale dans un intervalle du temps de durée t . Etant

donné que cette trajectoire est arbitraire, donc on peut définir une variation petite $\delta q(t')$ de la trajectoire, telle que

$$\delta q(t') = q'(t') - q(t'). \quad (1.8)$$

Il est important de noter que cet écart ou variation tend vers zéro aux points d'extrémité $t' = 0$ et $t' = t$ puisque les trajectoires sont définies aux positions initiale $q(0)$ et finale $q(t)$ à l'instant $t' = 0$ et $t' = t$. Donc on peut écrire une variation d'action

$$\delta S = S' - S \quad (1.9)$$

$$= \int_0^t dt' L(q'(t'), \dot{q}'(t')) - \int_0^t dt' L(q(t'), \dot{q}(t')) \quad (1.10)$$

$$= \delta \left[\int_0^t dt' L(q(t'), \dot{q}(t')) \right] \quad (1.11)$$

$$= \int_0^t dt' \delta L(q(t'), \dot{q}(t')) \quad (1.12)$$

et puisque $\delta q(t')$ est petite alors cette action est minimale et par suite $\delta S = 0$. L est une fonction de $q(t')$ et $\dot{q}(t')$, il vient que sa variation est

$$\delta L = \frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \quad (1.13)$$

$$= \frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{d}{dt'} \delta q \quad (1.14)$$

avec $\delta \dot{q} = \frac{d}{dt'} \delta q$, en plus on a

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{d}{dt'} \delta q = \frac{d}{dt'} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right] - \left(\frac{d}{dt'} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q \quad (1.15)$$

à remplacer dans (1.14) pour avoir

$$\delta L = \frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{d}{dt'} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right] - \left(\frac{d}{dt'} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q \quad (1.16)$$

et par suite Eq. (1.12) devient

$$\int_0^t dt' \left\{ \frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{d}{dt'} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right] - \left(\frac{d}{dt'} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q \right\} = 0 \quad (1.17)$$

qui peut s'écrire encore comme

$$\int_0^t dt' \delta q \left\{ \frac{\partial L}{\partial q} - \left(\frac{d}{dt'} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right\} + \int_0^t dt' \frac{d}{dt'} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right] = 0 \quad (1.18)$$

ce qui implique

$$\int_0^t dt' \delta q \left\{ \frac{\partial L}{\partial q} - \left(\frac{d}{dt'} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right\} + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_0^t = 0. \quad (1.19)$$

Rappelons que d'après les hypothèses $\delta q(0) = \delta q(t) = 0$, donc le deuxième terme dans Eq. (1.19) est nul et par conséquent on se trouve avec

$$\int_0^t dt' \delta q \left\{ \frac{\partial L}{\partial q} - \left(\frac{d}{dt'} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right\} = 0 \quad (1.20)$$

ce qui conduit à l'équation du mouvement suivante

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt'} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0 \quad (1.21)$$

dite aussi équation de *Euler-Lagrange*. Pour un système de N particules cette équation se généralise comme

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt'} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, 3N. \quad (1.22)$$

et chaque particule possède trois coordonnées spatiales.

1.3.3 Moment généralisé

Par définition, le moment conjugué généralisé de coordonnée généralisée q_i est la quantité donnée par la relation

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}. \quad (1.23)$$

Exemple: Considérons le Lagrangien en coordonnées cartésiennes Eq. (1.5), donc les moments correspondants sont

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \quad (1.24)$$

$$p_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y} \quad (1.25)$$

$$p_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m\dot{z}. \quad (1.26)$$

D'après Eq. (1.23) on peut exprimer Eq. (1.22) en fonction du moment conjugué, à savoir

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{dp_i}{dt'} = 0. \quad (1.27)$$

1.4 Mécanique de Hamilton

1.4.1 Introduction et définitions

La mécanique de Hamilton est basée sur la notion des coordonnées généralisées et les moments généralisés. Les lois de Newton donnent des équations différentielles de seconde ordre et exigent la nécessité des conditions initiales. Donc pour résoudre ces équations il faut les intégrer deux fois. Par exemple on considère l'équation différentielle suivante

$$m\ddot{x} = F_x = -\frac{dV(x)}{dx} \quad (1.28)$$

et multiplions cette équation par \dot{x} pour avoir

$$m\dot{x}\ddot{x} = -\dot{x} \frac{dV(x)}{dx}. \quad (1.29)$$

Après intégration, on trouve

$$\frac{m}{2} \dot{x}^2 = -V(x) + \text{cst} \quad (1.30)$$

où cette constante ce n'est rien que l'énergie mécanique

$$E_m \equiv \text{cst} = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x). \quad (1.31)$$

Il est clair que pour trouver la solution de cette dernière équation il faut encore intégrer une autre fois. Dans ce cadre Hamilton a introduit une quantité basée sur l'équation différentielle de première ordre.

Définition: Le Hamiltonien $H(q_i, p_i, t)$ est une fonction des coordonnées généralisées q_i et moments généralisés p_i . Il s'agit de la quantité suivante

$$H(q_i, p_i, t) = \dot{q}_i p_i - L(q_i, \dot{q}_i, t). \quad (1.32)$$

1.4.2 Equation du mouvement de Hamilton

Pour obtenir l'équation du mouvement d'après l'approche de Hamilton il faut calculer en premier lieu la dérivée totale de la fonction $H(q_i, p_i, t)$. En Effet,

$$dH = \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt \quad (1.33)$$

$$= d(\dot{q}_i p_i - L) \quad (1.34)$$

$$= \dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (1.35)$$

$$= \dot{q}_i dp_i + \underbrace{\left(p_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right)}_{=0} d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (1.36)$$

$$= \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (1.37)$$

En comparant Eqs. (1.33) et (1.37), on trouve les équations différentielles de première ordre suivantes

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (1.38)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i} = -\frac{dp_i}{dt} = -\dot{p}_i \quad (1.39)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \quad (1.40)$$

dites équations du mouvement de *Hamilton*.

Exemple 1: Considérons le Lagrangien à une dimension

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x). \quad (1.41)$$

Le moment est

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}. \quad (1.42)$$

Le Hamiltonien correspondant s'écrit comme

$$H = p_x \dot{x} - L \quad (1.43)$$

$$= p_x \dot{x} - \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x). \quad (1.44)$$

On remplace p_x pour avoir

$$H = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \quad (1.45)$$

qui est juste l'énergie de la particule.

Exemple 2: Particule en mouvement dans un potentiel central dont le Hamiltonien en coordonnées sphériques est

$$H = \frac{1}{2m} p_r^2 + \frac{1}{2mr^2} p_\theta^2 + \frac{1}{2mr^2 \sin^2 \theta} p_\varphi^2 + V(r) \quad (1.46)$$

qui représente l'énergie de la particule en coordonnées sphériques.

1.4.3 Temps d'évolution d'une grandeur physique

Etant donné une grandeur physique quelconque A , qui peut être représentée par une fonction des coordonnées positions et moments, notée $A(q_i, p_i, t)$. Le taux de variation de A par rapport au temps est donnée par la dérivée totale

$$\frac{dA}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial A}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial A}{\partial t}. \quad (1.47)$$

On remplace les dérivées des positions et des moments par les équations de mouvement de Hamilton pour avoir

$$\frac{dA}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial A}{\partial t}. \quad (1.48)$$

1.4.4 Crochet de Poisson

Le crochet de Poisson de deux quantités A et B est donné par l'expression

$$[A, B]_{\text{cp}} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right). \quad (1.49)$$

L'équation du mouvement de A peut être écrite en terme du crochet de Poisson, à savoir

$$\frac{dA}{dt} = [A, H]_{\text{cp}} + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (1.50)$$

A partir de la définition en haut, on peut conclure que le crochet de Poisson est anti-symétrique

$$[A, B]_{\text{cp}} = -[B, A]_{\text{cp}}. \quad (1.51)$$

Il est clair que

$$[A, A]_{\text{cp}} = 0. \quad (1.52)$$

Pour le Hamiltonien, on a

$$\frac{dH}{dt} = [H, H]_{\text{cp}} + \frac{\partial H}{\partial t} \implies \frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}. \quad (1.53)$$

Si le Hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps, donc il est constant. Autrement dit, l'énergie est une quantité conservée.

On peut établir une relation importante entre les coordonnées positions et moments canoniquement conjugués à travers le crochet de Poisson. Il s'agit de la relation

$$[p_j, q_k]_{\text{cp}} = \sum_i \left(\frac{\partial p_j}{\partial q_i} \frac{\partial q_k}{\partial p_i} - \frac{\partial p_j}{\partial p_i} \frac{\partial q_k}{\partial q_i} \right) \quad (1.54)$$

$$= 0 - \sum_i \delta_{ij} \delta_{ik} \quad (1.55)$$

$$= -\delta_{jk}. \quad (1.56)$$

Il est clair que les relations suivantes sont nulles

$$[p_j, p_k]_{\text{cp}} = [q_j, q_k]_{\text{cp}} = 0. \quad (1.57)$$

Ces crochets de Poisson vont jouer un rôle important dans la mécanique quantique. Ils sont reliés aux relations de commutation entre les positions et les moments.

1.5 Ondes

Une onde est une variation locale d'un paramètre physique qui se propage dans l'espace. Elle transporte de l'énergie sans transporter nécessairement de la matière. Une onde progressive se propageant dans la direction x , est décrite par une fonction de $(x - ct)$ où x est la position, t le temps et c est la célérité ou vitesse de propagation de l'onde. Par exemple une onde sinusoïdale dans un espace à une dimension s'écrit

$$A(x, t) = A_0 \cos(kx - \omega t + \varphi) \quad (1.58)$$

$$= \frac{A_0}{2} \left(e^{i(kx - \omega t + \varphi)} + e^{-i(kx - \omega t + \varphi)} \right) \quad (1.59)$$

où les quantités suivantes sont

1. A_0 est l'amplitude de l'onde
2. $kx - \omega t + \varphi$ est la phase
3. φ est la phase à l'origine
4. $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ est le vecteur d'onde
5. λ est la longueur d'onde
6. $\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{T}$ est la pulsation
7. ν est la fréquence
8. T est la période
9. $c = \frac{\omega}{k} = \frac{T}{\lambda}$ est la célérité.

Pour une onde représentée par une fonction $A(t)$ en un point donné de l'espace, on introduit l'intensité moyenne I de l'onde

$$I = \frac{1}{T} \int_0^T A^2(t) dt. \quad (1.60)$$

1.6 Particule chargée dans un champ électromagnétique

Dans l'approximation classique, une particule de charge q dans un champ électromagnétique $\vec{E}(\vec{r}, t)$ et $\vec{B}(\vec{r}, t)$ est soumise à une force de Lorentz

$$\vec{F} = q \left(\vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \dot{\vec{r}} \wedge \vec{B}(\vec{r}, t) \right) \quad (1.61)$$

qui agit comme une action du champ électrique $\vec{E}(\vec{r}, t)$ et du champ magnétique $\vec{B}(\vec{r}, t)$ sur la particule. En mécanique classique, les champs sont des observables par les forces qu'elles s'exercent sur une particule chargée.

1.6.1 Champ électromagnétique

Le champ électromagnétique vérifie les équations de Maxwell

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (1.62)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (1.63)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) \quad (1.64)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{B}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c} \vec{j}(\vec{r}, t) \quad (1.65)$$

où $\rho(\vec{r}, t)$ et $\vec{j}(\vec{r}, t)$ sont la densité de charge et la densité de courant, respectivement. Les deux dernières équations décrivent la relation entre les champs et les sources. Les deux premières équations sont les sources libres et sont automatiquement satisfaites si l'on introduit un potentiel scalaire $\phi(\vec{r}, t)$ et un potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r}, t)$ tels que

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (1.66)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \phi(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{r}, t). \quad (1.67)$$

En mécanique classique, le champ électrique $\vec{E}(\vec{r}, t)$ et le champ magnétique $\vec{B}(\vec{r}, t)$ sont considérés comme des champs physiques mesurables, par contre le potentiel scalaire $\phi(\vec{r}, t)$ et le potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r}, t)$ ne sont pas des quantités mesurables physiquement. Ces potentiels sont arbitraires et ils sont définis comme étant des solutions d'équations différentielles qui ont reliés à des quantités physiques mesurables $\vec{E}(\vec{r}, t)$ et $\vec{B}(\vec{r}, t)$. Puisque ces potentiels sont arbitraires donc il y a une transformation de jauge, qui signifie que les potentiels ne sont pas uniques. Si on remplace les potentiels par des nouvelles quantités

$$\phi(\vec{r}, t) \longrightarrow \phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(\vec{r}, t) \quad (1.68)$$

$$\vec{A}(\vec{r}, t) \longrightarrow \vec{A}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \vec{\nabla} \Lambda(\vec{r}, t) \quad (1.69)$$

avec $\Lambda(\vec{r}, t)$ est une fonction scalaire arbitraire quelconque, les champs physiques, $\vec{E}(\vec{r}, t)$ et $\vec{B}(\vec{r}, t)$, restent les mêmes. Cette transformation est dite transformation de jauge. Bien que les lois de la physique sont formulés en termes des champs de jauge $\phi(\vec{r}, t)$ et $\vec{A}(\vec{r}, t)$, les résultats physiques sont invariants de jauge.

1.6.2 Lagrangien d'une particule classique chargée

Le Lagrangien d'une particule classique dans un champ électromagnétique est exprimé comme suit

$$L = \frac{m}{2}\dot{\vec{r}}^2 - q\phi(\vec{r}, t) + \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \dot{\vec{r}}. \quad (1.70)$$

Le moment conjugué est

$$\vec{p} = m\dot{\vec{r}} + \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{r}, t). \quad (1.71)$$

L'équations du mouvement pour la particule classique prend la forme suivante

$$\frac{d}{dt} \left(m\dot{\vec{r}} + \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{r}, t) \right) = -q\vec{\nabla}\phi(\vec{r}, t) - \frac{q}{c}\vec{\nabla} \left(\vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \dot{\vec{r}} \right) \quad (1.72)$$

où la dérivée est une dérivée totale du temps. La dérivée totale du vecteur potentiel est

$$\frac{d}{dt} \vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{r}, t) + \dot{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla} \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (1.73)$$

qui décrit le changement au cours du temps du potentiel vecteur agissant sur la particule en mouvement. Le changement du potentiel vecteur peut se produire à cause de la dépendance temporelle explicite de $\vec{A}(\vec{r}, t)$ pour une position fixe ou bien il peut se produire par le déplacement de la particule vers une nouvelle position dans un champ non-uniforme correspondant au potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r}, t)$.

1.6.3 Hamiltonien d'une particule classique chargée

Le Hamiltonien d'une particule chargée est obtenue à travers le Lagrangien

$$H = \vec{p} \cdot \dot{\vec{r}} - L. \quad (1.74)$$

En utilisant Eqs. (1.70) and (1.71) pour avoir

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + q\phi(\vec{r}, t). \quad (1.75)$$

La présence du champ électromagnétique a introduit les changements suivants

$$\vec{p} \longrightarrow \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{r}, t) \quad (1.76)$$

$$H \longrightarrow H - q\phi(\vec{r}, t) \quad (1.77)$$

qui constitue le Hamiltonien de base utilisé dans l'équation de *Schrödinger* en mécanique quantique.

En développant le terme quadratique de l'énergie cinétique, on trouve le Hamiltonien comme étant la somme du terme non-perturbé et le terme d'interaction

$$H = \left(\frac{1}{2m} \vec{p}^2 + q\phi(\vec{r}, t) \right) + H_{\text{int}} \quad (1.78)$$

avec H_{int} décrit le couplage de la particule au potentiel vecteur

$$H_{\text{int}} = -\frac{q}{2mc} \left(\vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) + \vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \vec{p} \right) + \frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2(\vec{r}, t) \quad (1.79)$$

où le premier terme linéaire en A est le couplage paramagnétique et le dernier terme du second degré de A est connu comme l'interaction diamagnétique. Pour un champ magnétique uniforme $\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}$, le potentiel vecteur prend la forme

$$\vec{A}(\vec{r}) = -\frac{1}{2} \vec{r} \wedge \vec{B}. \quad (1.80)$$

Donc H_{int} devient

$$H_{\text{int}} = \frac{q}{2mc} \left((\vec{r} \wedge \vec{B}) \cdot \vec{p} \right) + \frac{q^2}{8mc^2} (\vec{r} \wedge \vec{B})^2 \quad (1.81)$$

Le premier terme peut s'écrire comme étant le terme d'interaction de *Zeeman* entre le moment magnétique orbital et le champ magnétique

$$H_{\text{int}} = -\frac{q}{2mc} (\vec{B} \cdot \vec{L}) + \frac{q^2}{8mc^2} (\vec{r} \wedge \vec{B})^2 \quad (1.82)$$

où le moment cinétique (orbital)

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} \quad (1.83)$$

est relié au moment orbital magnétique M par

$$\vec{M} = \frac{q}{2mc} \vec{L} \quad (1.84)$$

comme montre Fig 1.1. Donc le terme de *Zeeman* devient

$$H_Z = -\vec{M} \cdot \vec{B} \quad (1.85)$$

qui tend à aligner le moment magnétique parallèle au champ magnétique.

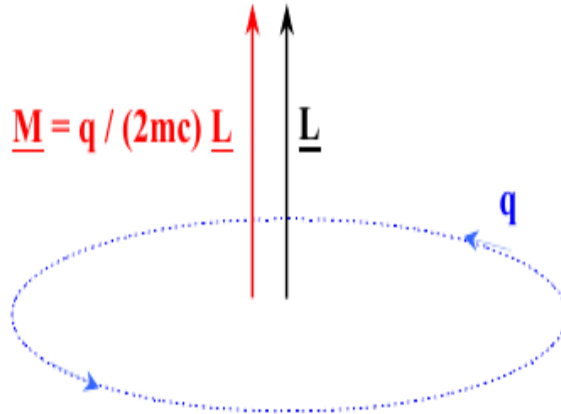


Fig 1.1: Une particule de charge q possédante un moment cinétique L et un moment magnétique M , qui sont parallèles.