Mécanique Quantique 1 —– CORRIGÉ

Séance d'exercices 5 : particule chargée dans un champ magnétique uniforme.

Exercice 1

On calcule le commutateur de $\vec{p}$ et $\vec{A}$ en utilisant le fait que $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ et en l'appliquant à une certaine fonction f.

$$\begin{aligned}
[\vec{p}, \vec{A}]f &= \vec{p}\vec{A}f - \vec{A}\vec{p}f \\
&= -i\hbar\vec{\nabla}(\vec{A}f) + i\hbar\vec{A}(\vec{\nabla}f) \\
&= -i\hbar(\vec{\nabla}\cdot\vec{A})f - i\hbar\big(\vec{A}\cdot(\vec{\nabla}f)\big) + i\hbar\big(\vec{A}\cdot(\vec{\nabla}f)\big) \\
&= -i\hbar(\vec{\nabla}\cdot\vec{A})f
\end{aligned}$$

Ainsi, $[\vec{p}, \vec{A}] = -i\hbar(\vec{\nabla}\cdot\vec{A})$.
Afin de simplifier ce commutateur, une jauge évidente apparaît : la jauge de coulomb qui est telle que

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$$

Alors, le commutateur devient simplement nul (i.e. $\vec{p}\vec{A} = \vec{A}\vec{p}$) et on peut maintenant simplifier l'hamiltonien :

$$\begin{aligned}
H &= \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} \\
&= \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})(\vec{p} - q\vec{A}) \\
&= \frac{1}{2m}(\vec{p}^2 - q\vec{p}\vec{A} - q\vec{A}\vec{p} + q^2\vec{A}^2) \\
&= \frac{1}{2m}(\vec{p}^2 - 2q\vec{A}\vec{p} + q^2\vec{A}^2)
\end{aligned}$$

Exercice 2

Soit $\vec{A} = Bx\vec{j}$. On peut calculer le champ magnétique en utilisant $\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$:

$$\begin{aligned}
\vec{B} &= \vec{\nabla}\times\vec{A} \\
&= \begin{pmatrix}\partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z\end{pmatrix} \times \begin{pmatrix}0 \\ Bx \\ 0\end{pmatrix} \\
&= \begin{vmatrix}\vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ 0 & Bx & 0\end{vmatrix} \\
&= \vec{i}(0 - \partial_z Bx) - \vec{j}(0 - 0) + \vec{k}(\partial_x Bx - 0) \\
&= B\vec{k}
\end{aligned}$$

On a donc bien un champ uniforme dans la direction des z.
Pour vérifier que le potentiel vecteur $\vec{A}$ corresponde bien à notre choix de jauge, il suffit de calculer sa divergence et de vérifier qu'elle est bien nulle.

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}\cdot\vec{A} &= \begin{pmatrix}\partial_x & \partial_y & \partial_x\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}0\\ Bx\\ 0\end{pmatrix}\\
&= \partial_x\cdot 0+\partial_y\cdot(Bx)+\partial_z\cdot 0\\
&= 0
\end{aligned}$$

Pour réécrire l'hamiltonien en fonction de B, il faut calculer

$$\vec{A}\vec{p}=0+Bxp_y+0=-i\hbar Bx\partial_y \qquad \text{et} \qquad \vec{A}^2=0+B^2x^2+0=B^2x^2$$

alors,

$$H=\frac{1}{2m}\big(-\hbar^2\vec{\nabla}^2+2i\hbar qBx\partial_y+q^2B^2x^2\big)$$

Exercice 3

Calculons le commutateur de H avec p_x, p_y et p_x en se souvenant que toutes les composantes de $\vec{p}$ commutent toutes entre elles et que $[x_i,p_j]=i\hbar\delta_{i\,j}$:

$$\begin{aligned}
[H,\vec{p}_x] &= \frac{1}{2m}\left(-\hbar^2[\vec{\nabla}^2,p_x]+2i\hbar qB[x\partial_y,p_x]+q^2B^2[x^2,p_x]\right)\\
&= \frac{1}{2m}\left([p_x^2+p_y^2+p_z^2,p_x]-2qB[xp_y,p_x]+q^2B^2[x^2,p_x]\right)\\
&= \frac{1}{2m}\left(0-2qB\big(x[p_y,p_x]+[x,p_x]p_y\big)+q^2B^2\big(x[x,p_x]+[x,p_x]x\big)\right)\\
&= \frac{1}{2m}\left(-2qB(0+i\hbar p_y)+q^2B^2(xi\hbar+i\hbar x)\right)\\
&= i\hbar\frac{qB}{m}\left(qBx-p_y\right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[H,\vec{p}_y] &= \frac{1}{2m}\left(-\hbar^2[\vec{\nabla}^2,p_y]+2i\hbar qB[x\partial_y,p_y]+q^2B^2[x^2,p_y]\right)\\
&= \frac{1}{2m}\left([p_x^2+p_y^2+p_z^2,p_y]-2qB[xp_y,p_y]+q^2B^2[x^2,p_y]\right)\\
&= \frac{1}{2m}\left(0-2qB\big(x[p_y,p_y]+[x,p_y]p_y\big)+q^2B^2\big(x[x,p_y]+[x,p_y]x\big)\right)\\
&= \frac{1}{2m}\left(-2qB(0+0)+q^2B^2(0+0)\right)\\
&= 0
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
[H, \vec{p}_z] &= \frac{1}{2m}\bigg(- \hbar^2[\vec{\nabla}^2, p_z] + 2i\hbar qB[x\partial_y, p_z] + q^2B^2[x^2, p_z]\bigg) \\
&= \frac{1}{2m}\bigg([p_x^2 + p_y^2 + p_z^2, p_z] - 2qB[xp_y, p_z] + q^2B^2[x^2, p_z]\bigg) \\
&= \frac{1}{2m}\bigg(0 - 2qB\big(x[p_y, p_z] + [x, p_z]p_y\big) + q^2B^2\big(x[x, p_z] + [x, p_z]x\big)\bigg) \\
&= \frac{1}{2m}\bigg(- 2qB(0+0) + q^2B^2(0+0)\bigg) \\
&= 0
\end{aligned}
$$

Ainsi, p_y et p_z commutent avec H. Or, comme p_y et p_z commutent également entre eux, on peut dire que $\{H, p_y, p_z\}$ forment un ECOC (ensemble complet d'opérateurs qui commutent).

Exercice 4

Soit $\psi(x, y, z) = \phi(x)e^{ik_y y}e^{ik_z z}$. Résolvant l'équation de Schrödinger $H\psi = E\psi$

$$
\begin{aligned}
H\psi &= \frac{1}{2m}\bigg(- \hbar^2\vec{\nabla}^2 + 2i\hbar qBx\partial_y + q^2B^2x^2\bigg)\phi(x)e^{ik_y y}e^{ik_z z} \\
&= \frac{1}{2m}\bigg(- \hbar^2\Big(\phi''(x)e^{ik_y y}e^{ik_z z} - k_y^2\phi(x)e^{ik_y y}e^{ik_z z} - kz^2\phi(x)e^{ik_y y}e^{ik_z z}\Big) \\
&\quad + \ 2i\hbar qBx\, ik_y\phi(x)e^{ik_y y}e^{ik_z z} + q^2B^2x^2\phi(x)e^{ik_y y}e^{ik_z z}\bigg) \\
&= \frac{1}{2m}e^{ik_y y}e^{ik_z z}\bigg(- \hbar^2\phi''(x) + \hbar^2(k_y^2 + k_z^2)\phi(x) - 2\hbar qBxk_y\phi(x) + q^2B^2x^2\phi(x)\bigg)
\end{aligned}
$$

Comme $H\psi = E\psi = E\phi(x)e^{ik_y y}e^{ik_z z}$, on trouve finalement une équation simplement en x :

$$
\frac{1}{2m}\bigg(- \hbar^2\phi''(x) + \hbar^2(k_y^2 + k_z^2)\phi(x) - 2\hbar qBxk_y\phi(x) + q^2B^2x^2\phi(x)\bigg) = E\phi(x)
$$

Équation qu'on peut réécrire comme celle de l'oscillateur harmonique en une dimension :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m}\Bigg(-\hbar^2\phi''(x) + \hbar^2(k_y^2+k_z^2)\phi(x) - 2\hbar qBxk_y\phi(x) + q^2B^2x^2\phi(x)\Bigg) &= E\phi(x) \\
\frac{-\hbar^2}{2m}\phi''(x) + \left(-\frac{\hbar qBxk_y}{m} + \frac{q^2B^2x^2}{2m}\right)\phi(x) &= \left(E - \frac{\hbar^2(k_y^2+k_z^2)}{2m}\right)\phi(x) \\
\frac{-\hbar^2}{2m}\phi''(x) + \left[\frac{q^2B^2}{2m}\left(x - \frac{\hbar k_y}{qB}\right)^2 - \frac{\hbar^2k_y^2}{2m}\right]\phi(x) &= \left(E - \frac{\hbar^2(k_y^2+k_z^2)}{2m}\right)\phi(x) \\
\frac{-\hbar^2}{2m}\phi''(x) + \frac{q^2B^2}{2m}\left(x - \frac{\hbar k_y}{qB}\right)^2\phi(x) &= \left(E - \frac{\hbar^2(k_y^2+k_z^2)}{2m} + \frac{\hbar^2k_y^2}{2m}\right)\phi(x) \\
\frac{-\hbar^2}{2m}\phi''(x) + \frac{q^2B^2}{2m}\left(x - \frac{\hbar k_y}{qB}\right)^2\phi(x) &= \left(E - \frac{\hbar^2k_z^2}{2m}\right)\phi(x) \\
\frac{-\hbar^2}{2m}\phi''(x) + \frac{1}{2}m\omega^2(x-x_0)^2\phi(x) &= E'\phi(x)
\end{aligned}$$

$$\text{avec} \qquad \omega = \frac{qB}{m}, \qquad x_0 = \frac{\hbar k_y}{qB} \qquad \text{et} \qquad E' = E - \frac{\hbar^2k_z^2}{2m}$$

Notons que le choix de poser $\psi(x,y,z) = \phi(x)e^{ik_yy}e^{ik_zz}$ n'est pas aléatoire. En fait, il est facile de remarque que la fonction $e^{ik_yy}e^{ik_zz}$ est fonction propre de p_y et de p_z (ce sont des ondes planes). Or ces opérateurs commutent avec H. Ainsi, ces fonctions doivent donc aussi être fonctions propres de H, ce qui nous incitent à poser $\psi(x,y,z) = \phi(x)e^{ik_yy}e^{ik_zz}$.

Exercice 5

Puisque l'équation se ramène à celle de l'oscillateur harmonique en une dimension, on connait ses vecteurs propres et ses valeurs propres. Le spectre d'énergie est

$$E'_n = \hbar\omega(n+1/2) = \frac{\hbar qB}{m}(n+1/2)$$

Mais

$$E'_n = E_n - \frac{\hbar^2k_z^2}{2m}$$

et donc les énergies du problème de départ sont

$$E_n = \frac{\hbar qB}{m}(n+1/2) + \frac{\hbar^2k_z^2}{2m}$$

On remarque que les spectre est infiniment dégénéré, car on aura la même énergie pour toutes les valeurs k_y.
Les fonctions propres du problèmes, quant à elles, seront les fonctions $\psi(x,y,z) = \phi(x)e^{ik_yy}e^{ik_zz}$ où les $\phi(x)$ sont les fonctions propres de l'oscillateur harmonique en une dimension ayant pour fréquence $\omega = \frac{qB}{m}$.

Exercice 6

La situation décrite ici est toujours celle d'une particule chargée (en l'occurrence un électron) dans un champ uniforme dans la direction des z. Les électrons sont toutefois confinés dans une région en deux dimensions dans le plan $x - y$. La composante k_z du vecteur d'onde est donc nulle. Ainis, la fonction d'onde du problème est $\psi(x, y) = \phi(x)e^{ik_y y}$ et les énergies sont

$$E_n = \frac{\hbar q B}{m}(n + 1/2)$$

Il y a, comme avant, une dégénérescence sur les valeurs de k_y, mais cette dégénérescence n'est pas infinie, car les électrons sont confinées dans une région bornée. Ainsi, on aura une restriction sur les valeurs possibles de k_y.
Les conditions aux bords nous donnent les équations suivantes :

$$\psi(x, 0) = \psi(x, l_y) = 0 \qquad \text{et} \qquad \psi(0, y) = \psi(l_x, y) = 0$$

Maintenant, plutôt que de prendre simplement $\psi(x, y) = \phi(x)e^{ik_y y}$ comme fonction d'onde, on va choisir une fonction d'onde plus générale qui tient compte des ondes se déplaçant aussi bien vers la droite que vers la gauche. Ainsi,

$$\psi(x, y) = \phi(x)\Big(C_+ e^{ik_y y} + C_- e^{-ik_y y}\Big) = \phi(x)\Big(A_1 \cos(k_y y) + A_2 \sin(k_y y)\Big)$$

Alors, la condition $\psi(x, 0) = 0$ nous indique que $A_1 = 0$ et donc $\psi(x, y) = A_2 \phi(x) \sin(k_y y)$. La condition $\psi(x, l_y) = 0$ quant à elle nous indique que

$$\sin(k_y l_y) = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad k_y l_y = N\pi \qquad \Leftrightarrow \qquad k_y = \frac{N\pi}{l_y}$$

On se souvient maintenant que pour résoudre l'hamiltonien sous la forme d'un oscillateur harmonique, on a posé $x_0 = \frac{\hbar k_y}{qB}$ et bien sûr, ce x_0 doit être dans le domaine $[0, l_x]$. Ainsi :

$$0 < \frac{\hbar k_y}{qB} < l_x \qquad \Leftrightarrow \qquad 0 < \frac{\hbar N \pi}{q B l_y} < l_x \qquad \Leftrightarrow \qquad 0 < N < \frac{q B l_x l_y}{\pi \hbar}$$

et le nombre de dégénérescences est donnée par l'entier inférieur à $\frac{qBl_x l_y}{\pi\hbar}$, car pour chaque fonction d'onde, toutes les valeurs de N entières inférieurs à $\frac{qBl_x l_y}{\pi\hbar}$ sont admissibles, tout en donnant la même énergie.

Application numérique

On soumet l'échantillon de germanium a un rayon laser de $\lambda = 337\,\mu m$. On nous dit alors qu'il y aura une raie d'absorption avec cette longueur d'onde là si l'échantillon se trouve dans un champ magnétique de $2.605T$. Or, pour qu'il y ait une raie d'absorption, il faut que l'électron passe d'un niveau d'énergie à un autre. Au numéro précédent, on a vu que l'énergie totale du problème est

$$E_n = \frac{\hbar q B}{m}(n + 1/2) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \frac{\hbar q B}{m}(n + 1/2) \qquad \text{car } k_z = 0$$

C'est à dire que la différence d'énergie entre deux niveau est

$$E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar q B}{m} = 1.0546 \cdot 10^{-34} J\, s \, \frac{1.602 \cdot 10^{-19} C \, 2.605 T}{m} = \frac{4.401 \cdot 10^{-53} J\, kg}{m}$$

(on se souvient que $T = \frac{kg}{A \cdot s^2}$ et $C = A \cdot s$).
Ici, m ne représente pas la masse de l'électron, mais la masse effective, c'est-à-dire la masse que l'électron semble avoir lorsqu'il est soumis aux différentes forces et qu'on le considère comme une particule libre.

l'énergie fournie par le laser se calcule ainsi :

$$E_{laser} = h\nu = h\frac{c}{\lambda} = 6.626 \cdot 10^{-34} J\,s \frac{299\,792\,458\, m/s}{337 \cdot 10^{-6} m} = 5.894 \cdot 10^{-22} J$$

Puisque le laser permet une raie d'absorption, il donne donc la bonne énergie pour changer de niveau. C'est-à-dire que

$$\frac{4.401 \cdot 10^{-53} J\,kg}{m} = 5.894 \cdot 10^{-22} J \qquad \Leftrightarrow \qquad m = 7.47 \cdot 10^{-31} kg$$

On en a donc déduit la masse effective du germanium .

Pour connaître le nombre de dégénérescence, il suffit d'utiliser la formule trouvée précédemment :

$$N = \left[\frac{qBl_xl_y}{\pi\hbar}\right] = \left[\frac{1.602 \cdot 10^{-19} C\, 2.605 T\, 0.01 m\, 0.01 m}{\pi\, \frac{6.626 \cdot 10^{-34} J\,s}{2\pi}}\right] \approx \left[1.26 \cdot 10^{11}\right]$$

Il y a donc plus de 100 milliards de dégénérescences.

Exercice 7

Examinons les modifications apportées lorsqu'on utilise la jauge de Coulomb $\vec{A}_c(x, y, z) = -By\vec{i}$
Premièrement, on note que changer de jauge ne modifie pas le champ magnétique. En effet,

$$\begin{aligned}
\vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A}_c \\
&= \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -By \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -By & 0 & 0 \end{vmatrix} \\
&= \vec{i}(0-0) - \vec{j}(0 - \partial_z(-By)) + \vec{k}(0 - \partial_y(-By)) \\
&= B\vec{k}
\end{aligned}$$

Voyons ce qu'il se passe avec l'hamiltonien :

$$H = \frac{(\vec{p} - q\vec{A}_c)^2}{2m} = \frac{(\vec{p} + qBy\vec{i})^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(p^2 + 2qByp_x + q^2B^2y^2\right)$$

On remarque que les deux jauges diffèrent par le gradient d'une fonction $f(xy)$. En effet, posons

$$\vec{A}_c = \vec{A} + \vec{\nabla} f(x, y, z) \qquad \Leftrightarrow \qquad \begin{pmatrix} 0 \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -By \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \partial_x f \\ \partial_y f \\ \partial_z f \end{pmatrix} \qquad \Leftrightarrow \qquad \begin{cases} \partial_x f = By \\ \partial_y f = Bx \\ \partial_z f = 0 \end{cases}$$

La troisième dérivée nous indique que la fonction f ne dépend en fait que de x et y. À l'aide des deux autres dérivées on trouve facilement que $f(x, y) = Bxy$.
Montrons maintenant que les éléments de matrice de l'observable de quantité de mouvement sont indépendants de la jauge si les fonctions d'ondes subissent un changement de phase local. Ici, la quantité de mouvement est $\vec{p} - q\vec{A}$. On va donc montrer du même coup que l'hamiltonien est lui aussi indépendant de jauge. Posons $|\psi'\rangle = |e^{i\theta(x,y,z)}\psi\rangle$.

$$
\begin{aligned}
\langle\psi'|\vec{p}-q\vec{A}_c|\psi'\rangle &= \langle e^{i\theta(x,y,z)}\psi|\vec{p}-q\vec{A}-q\big(\vec{\nabla}f\big)|e^{i\theta(x,y,z)}\psi\rangle \\
&= \langle\psi|e^{-i\theta(x,y,z)}\Big(\vec{p}-q\vec{A}-q\big(\vec{\nabla}f\big)\Big)\,e^{i\theta(x,y,z)}|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|e^{-i\theta(x,y,z)}\Big(-i\hbar\vec{\nabla}-q\vec{A}-q\big(\vec{\nabla}f\big)\Big)\,e^{i\theta(x,y,z)}|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|e^{-i\theta(x,y,z)}\Big(-i\hbar\big(\vec{\nabla}e^{i\theta(x,y,z)}\big)-i\hbar e^{i\theta(x,y,z)}\vec{\nabla}-q\vec{A}e^{i\theta(x,y,z)}-q\big(\vec{\nabla}f\big)e^{i\theta(x,y,z)}\big)\Big)|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|e^{-i\theta(x,y,z)}\Big(-i\hbar\vec{\nabla}e^{i\theta(x,y,z)}\Big)|\psi\rangle+\langle\psi|-i\hbar\vec{\nabla}-q\vec{A}-q\vec{\nabla}f\big|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\hbar\vec{\nabla}\theta(x,y,z)|\psi\rangle+\langle\psi|-i\hbar\vec{\nabla}-q\vec{A}-q\vec{\nabla}f\big|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\hbar\vec{\nabla}\theta(x,y,z)-q\vec{\nabla}f|\psi\rangle+\langle\psi|-i\hbar\vec{\nabla}-q\vec{A}\big|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\hbar\vec{\nabla}\theta(x,y,z)-q\vec{\nabla}f|\psi\rangle+\langle\psi|\vec{p}-q\vec{A}\big|\psi\rangle
\end{aligned}
$$

l'élément de matrice est donc inchangé si

$$
\hbar\vec{\nabla}\theta(x,y,z)=q\vec{\nabla}f \qquad \Leftrightarrow \qquad \theta(x,y,z)=\frac{q}{\hbar}f(x,y)
$$