

Cadre sans potentiel vecteur

Dans une jauge quelconque du champ électromagnétique, l'équation de Schrödinger pour une particule de charge q et de masse m s'écrit

$$\begin{equation} \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[\frac{1}{2m} \hbar^2 \nabla^2 - q \vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \nabla + q \Phi(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t). \end{equation}$$

Les dérivées covariantes associées au champ électromagnétique sont définies par

$$D_0 = \partial_t + i \frac{q}{\hbar} \Phi \quad \text{et} \quad D_k = \partial_{x_k} - i \frac{q}{\hbar} A_k \quad (k = 1, 2, 3).$$

Sous une transformation de jauge locale $\chi(\vec{r}, t)$, les potentiels se transforment selon

$$\vec{A}' = \vec{A} + \nabla \chi, \quad \Phi' = \Phi - \partial_t \chi,$$

et la fonction d'onde selon

$$\Psi'(\vec{r}, t) = e^{i \frac{q}{\hbar} \chi(\vec{r}, t)} \Psi(\vec{r}, t).$$

Le tenseur électromagnétique de Faraday, défini par

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu,$$

reste invariant sous cette transformation, assurant ainsi l'invariance des champs physiques \vec{E} et \vec{B} par changement de jauge.

Hamiltonien simplifié

Pour simplifier le Hamiltonien, on applique une transformation de jauge appropriée visant à éliminer explicitement le potentiel vecteur. Plus précisément, on introduit l'opérateur unitaire $T_\chi = \exp\left(i \frac{q}{\hbar} \chi(\vec{r}, t)\right)$ qui agit sur la fonction d'onde comme $\Psi' = T_\chi \Psi$ et modifie les potentiels selon les règles mentionnées ci-dessus. Sous cette transformation unitaire, l'Hamiltonien se transforme en

$$H' = T_\chi H T_\chi^{-1} + i \hbar (\partial_t T_\chi) T_\chi^{-1},$$

où $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - q \vec{A} \cdot \vec{v} + q \Phi$ est l'Hamiltonien d'origine. En choisissant la fonction de jauge $\chi(\vec{r}, t)$ de manière adéquate (par exemple $\chi(\vec{r}, t) = -\int^t \vec{r} \cdot \vec{E} \, d\tau$ pour un champ électrique transverse $\vec{E} \perp \vec{r}$ homogène), on peut faire disparaître le potentiel vecteur du Hamiltonien. Le nouvel Hamiltonien s'écrit alors

$$H' = \frac{\vec{p}^2}{2m} + q \Phi(\vec{r}, t) - \vec{D} \cdot \vec{E}_\perp(t),$$

avec l'opérateur dipolaire $\vec{D} = q \vec{r}$. Le couplage de la particule au champ électrique transverse apparaît ainsi sous la forme d'un terme dipolaire $\vec{D} \cdot \vec{E}_\perp$ (dans lequel $\vec{E}_\perp = -\partial_t \vec{A}$ dans la jauge choisie), ce qui justifie le caractère « dipolaire » de l'Hamiltonien obtenu.