

Contribution Wikipedia

L'hamiltonien de Pauli

(version d'origine)

L'hamiltonien d'une charge q de masse m et de spin $\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ plongée dans un champ électromagnétique $(\vec{A}(\vec{r}, t), U(\vec{r}, t))$ s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \vec{P} - q\vec{A}(\vec{R}, t) \right\}^2 + qU(\vec{R}, t) - \frac{q\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}(\vec{R}, t)$$

Le dernier terme représente l'interaction entre le moment magnétique de spin $\frac{q\hbar}{2m} \vec{\sigma}$

et le champ magnétique $\vec{B}(\vec{R}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{R}, t)$.

On rappelle que :

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \sigma_x [\vec{\nabla} \times \vec{A}]_x + \sigma_y [\vec{\nabla} \times \vec{A}]_y + \sigma_z [\vec{\nabla} \times \vec{A}]_z$$

$$\text{avec les matrices de Pauli : } \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Le rotationnel a pour expression: } \vec{\nabla} \times \vec{A} = \begin{pmatrix} \nabla_y A_z - \nabla_z A_y \\ \nabla_z A_x - \nabla_x A_z \\ \nabla_x A_y - \nabla_y A_x \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \vec{\sigma} \cdot \vec{B} &= \begin{pmatrix} [\vec{\nabla} \times \vec{A}]_z & [\vec{\nabla} \times \vec{A}]_x - i[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_y \\ [\vec{\nabla} \times \vec{A}]_x + i[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_y & -[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_z \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \nabla_x A_y - \nabla_y A_x & \nabla_y A_z - \nabla_z A_y - i(\nabla_z A_x - \nabla_x A_z) \\ \nabla_y A_z - \nabla_z A_y + i(\nabla_z A_x - \nabla_x A_z) & -\nabla_x A_y + \nabla_y A_x \end{pmatrix} \end{aligned}$$

En appliquant cet opérateur au spineur $[\psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$ on obtient:

Pour le terme $[\vec{\sigma} \cdot \vec{B}]_{11}$:

$$\begin{aligned} (\nabla_x A_y - \nabla_y A_x) \psi_+ &= \nabla_x A_y \psi_+ - \nabla_y A_x \psi_+ = \nabla_x (A_y \psi_+) - A_y \nabla_x \psi_+ - \nabla_y (A_x \psi_+) + A_x \nabla_y \psi_+ \\ &= [\nabla_x A_y - \nabla_y A_x + A_x \nabla_y - A_y \nabla_x] \psi_+ = [[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_z + [\vec{A} \times \vec{\nabla}]_z] \psi_+ \end{aligned}$$

Pour le terme $[\vec{\sigma} \cdot \vec{B}]_{12}$:

$$\begin{aligned}
& \nabla_y A_z \psi_- - \nabla_z A_y \psi_- - i(\nabla_z A_x \psi_- - \nabla_x A_z \psi_-) = \nabla_y (A_z \psi_-) - A_z \nabla_y \psi_- - \nabla_z (A_y \psi_-) + A_y \nabla_z \psi_- \\
& - i(\nabla_z (A_x \psi_-) - A_x \nabla_z \psi_- - \nabla_x (A_z \psi_-) + A_z \nabla_x \psi_-) \\
& = [\nabla_y A_z - \nabla_z A_y + A_y \nabla_z - A_z \nabla_y] \psi_- - i[(\nabla_z A_x - \nabla_x A_z + A_z \nabla_x - A_x \nabla_z)] \psi_- \\
& = \left[[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_x + [\vec{A} \times \vec{\nabla}]_x \right] \psi_- - i \left[[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_y + [\vec{A} \times \vec{\nabla}]_y \right] \psi_- \\
& \Rightarrow \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \begin{pmatrix} [\vec{\nabla} \times \vec{A}]_z + [\vec{A} \times \vec{\nabla}]_z & [\vec{\nabla} \times \vec{A}]_x + [\vec{A} \times \vec{\nabla}]_x - i[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_y - i[\vec{A} \times \vec{\nabla}]_y \\ [\vec{\nabla} \times \vec{A}]_x + [\vec{A} \times \vec{\nabla}]_x + i[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_y + i[\vec{A} \times \vec{\nabla}]_y & -[\vec{\nabla} \times \vec{A}]_z - [\vec{A} \times \vec{\nabla}]_z \end{pmatrix} \\
& = \sigma_x ([\vec{\nabla} \times \vec{A}]_x + [\vec{A} \times \vec{\nabla}]_x) + \sigma_y ([\vec{\nabla} \times \vec{A}]_y + [\vec{A} \times \vec{\nabla}]_y) + \sigma_z ([\vec{\nabla} \times \vec{A}]_z + [\vec{A} \times \vec{\nabla}]_z) \\
& = \vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) + \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{\nabla})
\end{aligned}$$

On rappelle : $\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \Rightarrow \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \frac{i}{\hbar} \vec{\sigma} \cdot \{(\vec{P} \times \vec{A}) + (\vec{A} \times \vec{P})\} = \frac{i}{q\hbar} \vec{\sigma} \cdot \{(\vec{P} \times q\vec{A}) + (q\vec{A} \times \vec{P})\}$

$$= -\frac{i}{q\hbar} \vec{\sigma} \cdot \{(\vec{P} - q\vec{A}) \times (\vec{P} - q\vec{A})\}$$

On rappelle la relation : $(\vec{\sigma} \cdot \vec{M})(\vec{\sigma} \cdot \vec{N}) = \vec{M} \cdot \vec{N} I + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{M} \times \vec{N})$ avec $\vec{M}, \vec{N}$ deux opérateurs quelconques.

$$\begin{aligned}
& \Rightarrow i\vec{\sigma} \cdot \{(\vec{P} - q\vec{A}) \times (\vec{P} - q\vec{A})\} = (\vec{\sigma} \cdot (\vec{P} - q\vec{A}))(\vec{\sigma} \cdot (\vec{P} - q\vec{A})) - (\vec{P} - q\vec{A})^2 I = \{\vec{\sigma} \cdot (\vec{P} - q\vec{A})\}^2 - (\vec{P} - q\vec{A})^2 I \\
& \Rightarrow \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = -\frac{1}{q\hbar} \{\vec{\sigma} \cdot (\vec{P} - q\vec{A})\}^2 + \frac{1}{q\hbar} (\vec{P} - q\vec{A})^2 I
\end{aligned}$$

Il vient alors :

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m} \{\vec{P} - q\vec{A}\}^2 + qU - \frac{q\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \frac{1}{2m} \{\vec{P} - q\vec{A}\}^2 + qU + \frac{1}{2m} \{\vec{\sigma} \cdot (\vec{P} - q\vec{A})\}^2 - \frac{1}{2m} (\vec{P} - q\vec{A})^2 \\
&= \frac{1}{2m} \{\vec{\sigma} \cdot (\vec{P} - q\vec{A}(\vec{R}, t))\}^2 + qU(\vec{R}, t)
\end{aligned}$$