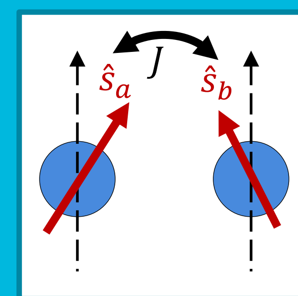
IMT Atlantique
Bretagne-Pays de la Loire
École Mines-Télécom

UEE - D
MÉCANIQUE QUANTIQUE

MOMENTS CINÉTIQUES EN MÉCANIQUE QUANTIQUE



Vincent Vlaminck
Vincent.vlaminck@imt-atlantique.fr
Dpt. MO

SOMMAIRE

Introduction

Quantification du moment cinétique
Expérience de Stern-Gerlach
Effet Zeeman
Effet Einstein-de-Haas

1. CM 1: Opérateurs associés au moment cinétique

Relations de commutation
Vecteurs propres et valeurs propres de $\hat{J}^2$ et $\hat{J_z}$
Représentation matricielle
Moment cinétique orbital (Harmoniques sphériques)

2. CM 2 : Moments cinétiques de spin et composition de moments

Moment cinétique de spin (Matrice de Pauli, mesure de spin, précession de Larmor)
Composition de moment cinétique - Moment cinétique total $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$

Références bibliographiques:

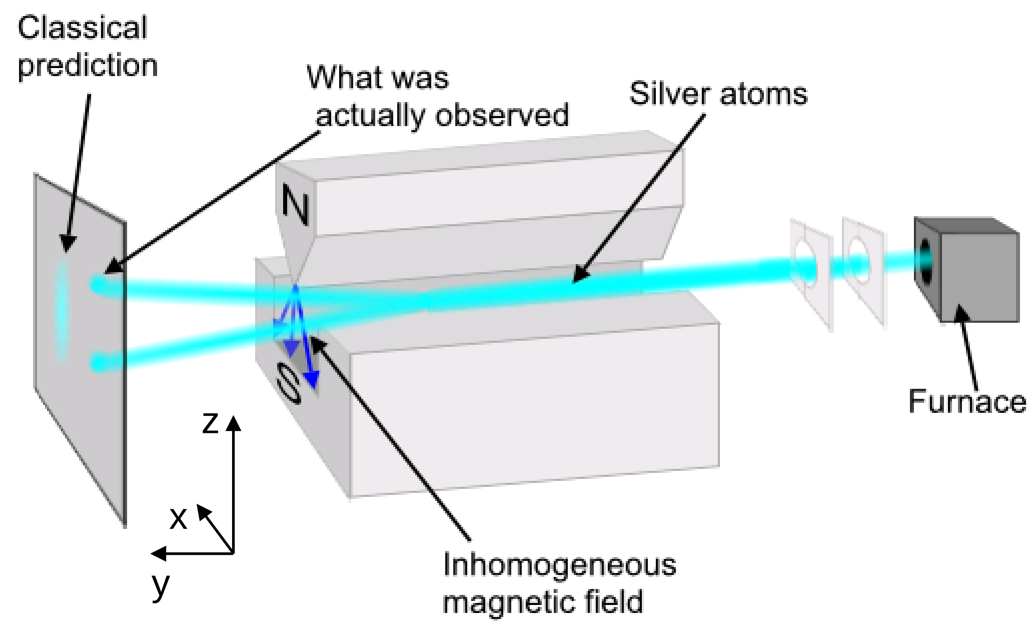
- ***« Quantum Mechanics, concepts and applicationq » 2nd edition, N. Zettili***
- ***« Introduction to Quantum Mechanics» 2nd edition, D. J. Griffiths***
- ***« Quantum Mechanics », Vol. 1 & 2, C. Tannoudji***

INTRODUCTION: EXPÉRIENCE DE STERN & GERLACH (1922)

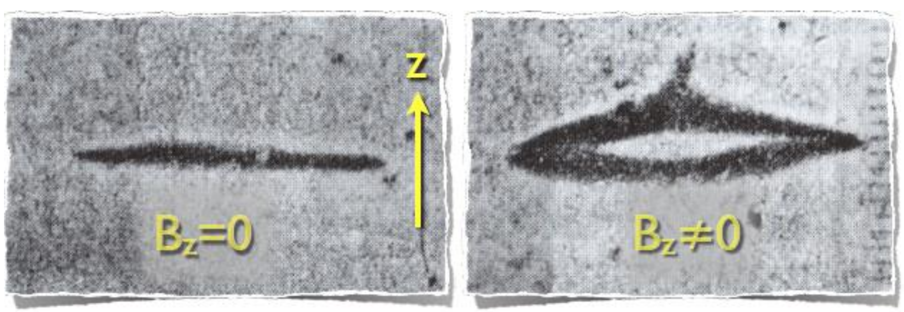
Principe: Faisceau d'atomes d'Ag traverse un champ magnétique inhomogène

Fort gradient selon z ($\frac{\partial B}{\partial z} \gg \frac{\partial B}{\partial x}, \frac{\partial B}{\partial y}$) $\Rightarrow$ Force magnétique sur les moments $\vec{\mu}$ des atomes d'Ag:

$$\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu}\,.\vec{B}) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \vec{u}_z$$



Observations: 2 taches symétriques dont la séparation est proportionnelle à B



Contradiction avec les prédictions classiques d'une deviation continue des atomes

$\Rightarrow$ 2 valeurs possibles pour la composante z du moment magnétique des atomes d'Ag:

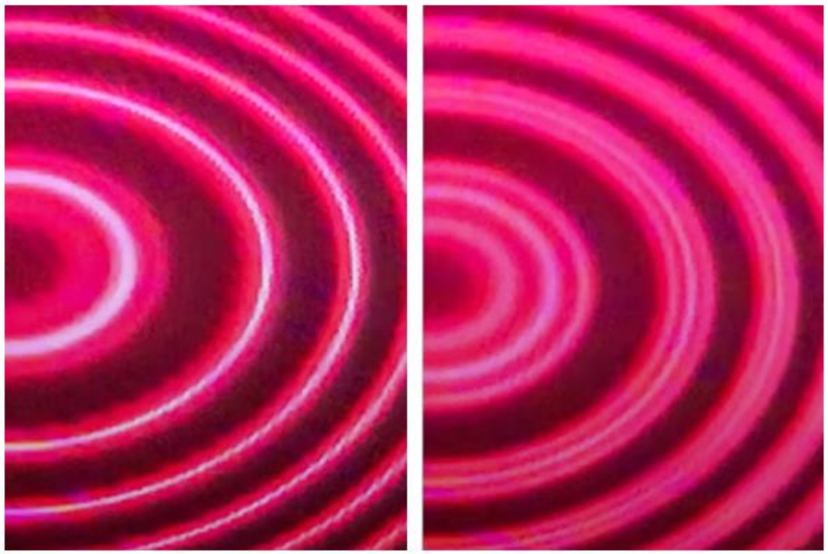
$$\mu_z = \pm\mu$$

Système à deux états,
Le moment magnétique est quantifié

INTRODUCTION: EFFET ZEEMAN (1896)

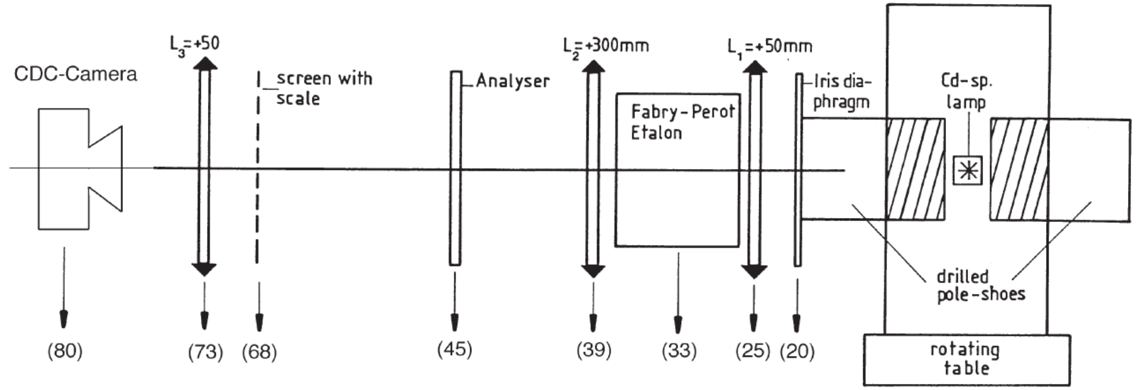
Levée de dégénérescence des raies spectrales d'une source lumineuse (Cd, Hg) placée dans un champ magnétique

$B = 0$ $\quad\quad$ $B \neq 0$



- $\boldsymbol{B = 0}$: les transitions énergétiques n'émettent qu'une seule raie lumineuse indépendamment de l'orientation du moment cinétique:

$$\Delta E_0 = E_2 - E_1 = h\frac{c}{\lambda}$$



- $\boldsymbol{B \neq 0}$: Apparition d'un nombre impaire de raies correspondant aux différentes transitions permises suivant l'orientation du moment magnétique:

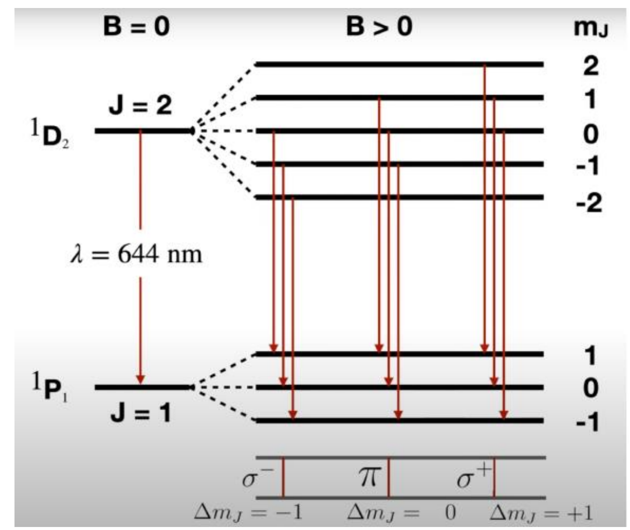
$$E_{mag} = -\vec{\mu}.\vec{B}$$

$$\Delta E = \Delta E_0 \pm \mu_B B$$

Magnéton de Bohr

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$$

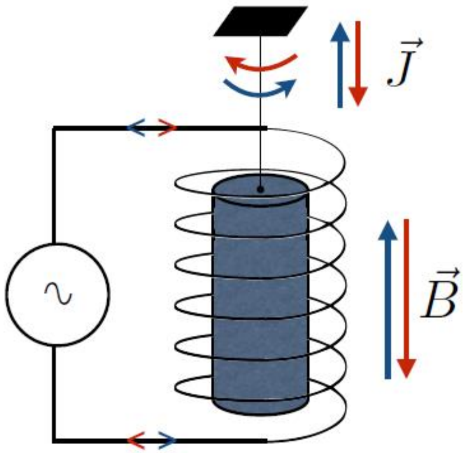
Quantification du moment magnétique en unité de μ_B



INTRODUCTION: EFFET EINSTEIN-DE-HAAS (1910)

Preuve expérimentale du lien entre moment cinétique ($\vec{J}$) et moment magnétique ($\vec{\mu}$)

Mise en rotation d'un cylindre ferromagnétique suspendu par une variation de champ magnétique extérieur



https://www.youtube.com/watch?v=qFkW0PHhXcY

Retournement de l'aimantation du cylindre sous l'effet du champ

\+

Conservation du moment cinétique totale: $\vec{J}_T = \vec{0} = \vec{J}_{rot} + \vec{J}_{magn}$

$$\vec{J}_{magn} = \frac{\vec{\mu}}{\gamma}$$

Rapport gyromagnétique:

$$\gamma = \frac{ge}{2m}$$

Rotation du à la compensation du moment cinétique induit des électrons

$$\vec{J}_{rot} = -\vec{J}_{magn}$$

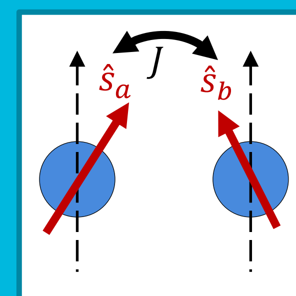
La réciproque a aussi été démontré:

Aimantation d'un matériau ferromagnétique par rotation mécanique (effet Barnett)

IMT Atlantique
Bretagne-Pays de la Loire
École Mines-Télécom

UEE - D
MÉCANIQUE QUANTIQUE:
MOMENTS CINÉTIQUES EN MÉCANIQUE QUANTIQUE

CM1- OPÉRATEURS ASSOCIÉS AU MOMENT CINÉTIQUE

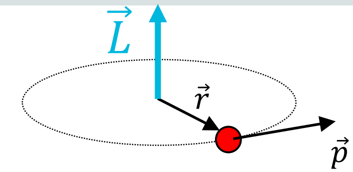


Vincent Vlaminck
Vincent.vlaminck@imt-atlantique.fr
Dpt. MO

MOMENT CINÉTIQUE EN MQ (définition)

Mécanique classique:
Moment cinétique d'une particule d'impulsion $\vec{p}(t)$ localisé en $\vec{r}(t)$:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}$$



Mécanique quantique: Le moment cinétique orbital s'obtient en remplaçant $\vec{r}(t)$ et $\vec{p}(t)$ par les opérateurs correspondant $\hat{R}(t)$ et $\hat{P}(t) = -i\hbar\vec{\nabla}$:

$$\hat{L} = \hat{R} \times \hat{P} = -i\hbar\hat{R} \times \vec{\nabla} = -i\hbar \begin{pmatrix} \hat{y}\frac{\partial}{\partial z} - \hat{z}\frac{\partial}{\partial y} \\ \hat{z}\frac{\partial}{\partial x} - \hat{x}\frac{\partial}{\partial z} \\ \hat{x}\frac{\partial}{\partial y} - \hat{y}\frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix}$$

Opérateur associé à la norme du moment cinétique: $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

Relations de commutation:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = i\hbar\hat{L}_z$$

De même $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$ et $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$

Démo utilisant: $[\hat{x}, \hat{P}_x] = [\hat{y}, \hat{P}_y] = [\hat{z}, \hat{P}_z] = i\hbar$

$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad et \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (i \neq j)$

$$[\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - \underbrace{\cancel{[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z]}}_{=0} - \underbrace{\cancel{[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x]}}_{=0} + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z]$$

$$= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_z$$

$$= -i\hbar\,\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_z = i\hbar\,\hat{L}_z \qquad \text{(cqfd)}$$

Conséquences:
Les opérateurs $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ ne commutent pas entre eux:

- **ils ne possèdent pas de bases propres communes**
- **Il est impossible de mesurer précisément les différentes composantes du moment cinétiques simultanément:** $\boldsymbol{\delta\hat{L}_x\,\delta\hat{L}_y \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{L}_x, \hat{L}_y]\rangle\right| = \frac{\hbar}{2}\langle\hat{L}_z\rangle}$

En résumé: Un opérateur de moment cinétique $\hat{\vec{j}}$ doit satisfaire les relations de commutations

$$\hat{\vec{j}} \times \hat{\vec{j}} = i\hbar\hat{\vec{j}}$$

ETATS PROPRES D'UN OPÉRATEUR $\hat{\vec{J}}$

Propriété:

Soit $\hat{\vec{J}}$ un opérateur de moment cinétique, l'opérateur $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ commute avec chacune des composantes $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$, $\hat{J}_z$

Démo:

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_x] &= [\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2, \hat{J}_x] \\ &= [\hat{J}_x^2, \hat{J}_x] + \hat{J}_y[\hat{J}_y, \hat{J}_x] + [\hat{J}_y, \hat{J}_x]\hat{J}_y + \hat{J}_z[\hat{J}_z, \hat{J}_x] + [\hat{J}_z, \hat{J}_x]\hat{J}_z \\ &= -i\hbar\,(\hat{J}_y\hat{J}_z + \hat{J}_z\hat{J}_y) + i\hbar\,(\hat{J}_z\hat{J}_y + \hat{J}_y\hat{J}_z) \\ &= 0\end{aligned}$$

Conséquence:

- Il possible de mesurer précisément et simultanément la norme du moment cinétique et une des ces composantes au choix (mais pas les trois simultanés).
- Par convention, on choisit une base propre commune entre $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ et la composantes $\hat{J}_z$ pour définir un état.

Théorème:

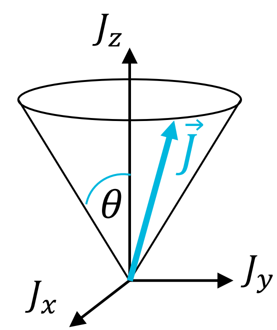
Les états propres d'un opérateur de moment cinétique $\hat{\vec{J}}$ notés $|\boldsymbol{j}, \boldsymbol{m}>$ doivent satisfaire les propriétés suivantes:

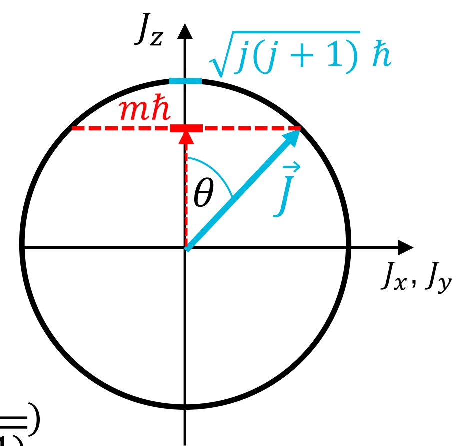
- $\hat{\boldsymbol{J}}^2\,|\boldsymbol{j}, \boldsymbol{m}\rangle = \boldsymbol{j}(\boldsymbol{j}+\mathbf{1})\,\hbar^{\mathbf{2}}\,|\boldsymbol{j}, \boldsymbol{m}\rangle$
- $\hat{\boldsymbol{J}}_{\boldsymbol{z}}\,|\boldsymbol{j}, \boldsymbol{m}\rangle = \mathbf{m}\,\hbar\,|\boldsymbol{j}, \boldsymbol{m}\rangle$

Avec j entier ou demi-entier: $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2,$…etc…

et m peut prendre 2j+1 valeurs $-j \le m \le j$ telles que:

$$m = \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$$





$$\theta = \arccos\left(\frac{m}{\sqrt{j(j+1)}}\right)$$

$<\hat{\boldsymbol{J}}_{\boldsymbol{z}}>$ toujours strictement inférieur à $<\sqrt{\hat{\boldsymbol{J}}^2}>$

DÉMONSTRATION DES ÉTATS PROPRES DE $\hat{J}^2$ et $\hat{\vec{J}}$ (i)

- On considère une base commune pour les états propres de $\hat{J}^2$ et $\hat{J}_z$ notés $|\alpha,\beta\rangle$ ayant respectivement pour valeurs propres $\alpha\hbar^2$ et $\beta\hbar$:

$$\begin{cases} \hat{J}^2\,|\alpha,\beta\rangle = \alpha\hbar^2|\alpha,\beta\rangle \\ \hat{J}_z\,|\alpha,\beta\rangle = \beta\hbar|\alpha,\beta\rangle \end{cases}$$

$(\alpha,\beta) \in \mathbb{C}$ sans dimensions, tels tous les états propres soient orthogonaux: $\langle\alpha',\beta'|\alpha,\beta\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}$

- On introduit les opérateurs d'échelle comme dans le cas de l'oscillateur harmonique:

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\,\hat{J}_y$$

tels que $\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$

On a les relations de commutation: $[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0$; $[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\,\hbar\hat{J}_z$; $[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm$

Et on observe les expressions: $\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\,\hat{J}_z$; $\hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\,\hat{J}_z$

- Comment les opérateurs d'échelle agissent sur les états propres $|\alpha,\beta>$?

$$\left.\begin{aligned} &\hat{J}_z\,(\hat{J}_\pm|\alpha,\beta\rangle) = (\hat{J}_\pm\hat{J}_z \pm \hbar\hat{J}_\pm)\,|\alpha,\beta\rangle = (\beta\pm 1)\hbar\,\hat{J}_\pm|\alpha,\beta\rangle \\ &\hat{J}^2\,\left(\hat{J}_\pm\,|\alpha,\beta\rangle\right) = \hat{J}_\pm\hat{J}^2\,|\alpha,\beta\rangle = \alpha\hbar^2\,\hat{J}_\pm|\alpha,\beta\rangle \end{aligned}\right\}$$

$\hat{J}_\pm|\alpha,\beta>$ état propre de $\hat{J}_z$ et $\hat{J}^2$ avec valeurs propres $(\beta+1)\hbar$ et $\alpha\hbar^2$ respectivement

$$\Rightarrow \quad \hat{J}_\pm|\alpha,\beta\rangle = C^\pm_{\alpha,\beta}\,|\alpha,\beta\pm 1\rangle$$

DÉMONSTRATION DES ÉTATS PROPRES DE $\hat{J}^2$ et $\hat{\vec{J}}$ (ii)

- $\boldsymbol{\beta}$ possède des limites supérieure $\boldsymbol{\beta_{max}}$ et inférieure $\boldsymbol{\beta_{min}}$ telles que:

$$\hat{J}_+|\alpha,\beta_{max}\rangle = 0 \qquad \text{et} \qquad \hat{J}_-|\alpha,\beta_{min}\rangle = 0\ ,$$

avec un nombre entier $\boldsymbol{n}$ d'application de $\hat{J}_\pm$ pour passer de $\boldsymbol{\beta_{max}}$ à $\boldsymbol{\beta_{min}}$

Demo: $\mathbf{0} \leq \langle\alpha,\beta|(\hat{J}_x^2+\hat{J}_y^2)|\alpha,\beta\rangle = \langle\alpha,\beta|(\hat{J}^2-\hat{J}_z^2)|\alpha,\beta\rangle = \hbar^2(\alpha-\beta^2) \Longrightarrow \alpha \geq \beta^2$

$$0 = \hat{J}_-\hat{J}_+|\alpha,\beta_{max}\rangle = (\hat{J}^2-\hat{J}_z^2-\hbar\hat{J}_z)|\alpha,\beta_{max}\rangle = (\alpha-\beta^2-\beta)\hbar^2 \Longrightarrow \alpha = \beta_{max}(\beta_{max}+1)$$

$$0 = \hat{J}_+\hat{J}_-|\alpha,\beta_{min}\rangle = (\hat{J}^2-\hat{J}_z^2+\hbar\hat{J}_z)|\alpha,\beta_{min}\rangle = (\alpha-\beta^2+\beta)\hbar^2 \Longrightarrow \alpha = \beta_{min}(\beta_{min}-1)$$

$$\beta_{max} = -\beta_{min}$$

Conclusion: $\boldsymbol{\beta_{max} = \beta_{min} + n} \Longrightarrow \boldsymbol{\beta_{max} = -\beta_{min} = \frac{n}{2}}$

On note par convention $\boldsymbol{\beta_{max} = j}$ est entier ou demi-entier suivant la parité de $\boldsymbol{n}$.
$\mathbf{2}\boldsymbol{j}+\mathbf{1}$ correspond aux nombre d'états possibles pour $\hat{J}_z$,
et $-\boldsymbol{j} \leq \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{m} \leq \boldsymbol{j}$ traduit la projection sur l'axe z de $\hat{\vec{J}}$.

Les états propres d'un opérateur de moment cinétique $\hat{\vec{J}}$ notés $|j,m\rangle$ vérifient:

$$\hat{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)\,\hbar^2\,|j,m\rangle \qquad j = \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \ldots \text{ etc..}$$

$$\hat{J}_z|j,m\rangle = m\,\hbar|j,m\rangle \qquad m = \{-j, -j+1, \ldots, j-1, j\}$$

(cqfd)

PROJECTION de $\hat{J}_{\pm}, \hat{J}_x, \hat{J}_y$ ET REPRÉSENTATION MATRICIELLE

- Les états propres d'un opérateur de moment cinétique $\hat{\vec{J}}$ notés $|j, m\rangle$ vérifient

$$\hat{J}_{\pm}|j,m\rangle = C^{\pm}_{j,m}\ |j, m+1\rangle$$

Par ailleurs: $|C^{+}_{j,m}|^{2} = \langle j,m|\,\hat{J}_{+}^{\dagger}\hat{J}_{+}\,|j,m\rangle = \langle j,m|\,\hat{J}_{-}\hat{J}_{+}\,|j,m\rangle = \langle j,m|\hat{J}^{2} - \hat{J}_{z}^{2} - \hbar\,\hat{J}_{z}|j,m\rangle = \big(j(j+1) - m(m+1)\big)\,\hbar^{2}$

Et $|C^{-}_{j,m}|^{2} = \langle j,m|\,\hat{J}_{-}^{\dagger}\hat{J}_{-}\,|j,m\rangle = \langle j,m|\,\hat{J}_{+}\hat{J}_{-}\,|j,m\rangle = \langle j,m|\hat{J}^{2} - \hat{J}_{z}^{2} + \hbar\,\hat{J}_{z}|j,m\rangle = \big(j(j+1) - m(m-1)\big)\,\hbar^{2}$

- Les projection de $\hat{J}_{\pm}$sur la base propre $|j, m\rangle$ donne: $\hat{J}_{\pm}|j,m\rangle = \hbar\sqrt{\big((j \mp m)(j \pm m + 1)\big)}\ |j, m \pm 1\rangle$

Conséquences:

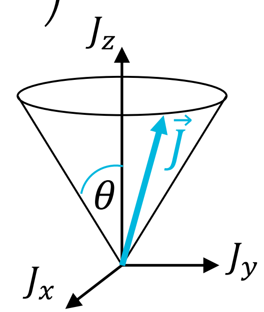
- $\hat{J}_x|j,m\rangle = \frac{1}{2}(\hat{J}_{+} + \hat{J}_{-})|j,m\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(\sqrt{\big((j-m)(j+m+1)\big)}\ |j, m+1\rangle + \sqrt{\big((j+m)(j-m+1)\big)}\ |j, m-1\rangle\right)$

- $\hat{J}_y|j,m\rangle = \frac{1}{2i}(\hat{J}_{+} - \hat{J}_{-})|j,m\rangle = \frac{\hbar}{2i}\left(\sqrt{\big((j-m)(j+m+1)\big)}\ |j, m+1\rangle - \sqrt{\big((j+m)(j-m+1)\big)}\ |j, m-1\rangle\right)$

Les valeurs moyennes $\langle\hat{J}_x\rangle$ et $\langle\hat{J}_y\rangle$ sont nulles: $\langle j,m|\hat{J}_x|j,m\rangle = \langle j,m|\hat{J}_y|j,m\rangle = 0$

- précession autour de la direction d'équilibre -

- pas d'info sur la phase de $\hat{J}$ à un instant donné -



REPRÉSENTATION MATRICIELLE : j=1

Ecrire les matrices représentant les opérateurs $\hat{\boldsymbol{J}}^2$, $\hat{\boldsymbol{J}}_{\boldsymbol{z}}$, $\hat{\boldsymbol{J}}_{\pm}$, $\hat{\boldsymbol{J}}_{\boldsymbol{x}}$, $\hat{\boldsymbol{J}}_{\boldsymbol{y}}$ dans la base propre commune à $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ et $\hat{\boldsymbol{J}}_{\boldsymbol{z}}$. Vérifier que $\hat{\boldsymbol{J}}_{\boldsymbol{z}}^{\boldsymbol{3}} = \hbar^{\boldsymbol{2}}\hat{\boldsymbol{J}}_{\boldsymbol{z}}$, et que $\hat{\boldsymbol{J}}_{\pm}^{\boldsymbol{3}} = \boldsymbol{0}$.

Pour $j = 1$, trois valeurs possibles pour m: $-1, 0, +1$.
Les états propres communs à $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ et $\hat{\boldsymbol{J}}_{\boldsymbol{z}}$ sont: $|1,-1\rangle$, $|1,0\rangle$, $|1,1\rangle$

REPRÉSENTATION MATRICIELLE : j=1

Ecrire les matrices représentant les opérateurs $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$, $\hat{J}_\pm$, $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$ dans la base propre commune à $\hat{J}^2$ et $\hat{J}_z$. Vérifier que $\hat{J}_z^3 = \hbar^2 \hat{J}_z$, et que $\hat{J}_\pm^3 = \mathbf{0}$.

Pour $j = 1$, trois valeurs possibles pour m: $-1, 0, +1$.
Les états propres communs à $\hat{J}^2$ et $\hat{J}_z$ sont: $|1,-1\rangle$, $|1,0\rangle$, $|1,1\rangle$

- $\hat{J}^2\,|j,m\rangle = j(j+1)\,\hbar^2\,|j,m\rangle \Longrightarrow \hat{J}^2 = 2\hbar^2\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$
- $\hat{J}_z\,|j,m\rangle = \mathbf{m}\,\hbar\,|j,m\rangle \Longrightarrow \hat{J}_z = \hbar\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$
- $\hat{J}_\pm|j,m\rangle = \hbar\sqrt{\left((j\mp m)(j\pm m+1)\right)}\,|j,m\pm 1\rangle \Longrightarrow \hat{J}_- = \hbar\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ \sqrt{2} & 0 & 0\\ 0 & \sqrt{2} & 0\end{pmatrix}$ et $\hat{J}_+ = \hbar\begin{pmatrix}0 & \sqrt{2} & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{2}\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$
- $\hat{J}_x|j,m\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(\sqrt{\left((j-m)(j+m+1)\right)}\,|j,m+1\rangle + \sqrt{\left((j+m)(j-m+1)\right)}\,|j,m-1\rangle\right)$
- $\hat{J}_y|j,m\rangle = \frac{\hbar}{2i}\left(\sqrt{\left((j-m)(j+m+1)\right)}\,|j,m+1\rangle - \sqrt{\left((j+m)(j-m+1)\right)}\,|j,m-1\rangle\right)$

$$\Longrightarrow \hat{J}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & \sqrt{2} & 0\\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2}\\ 0 & \sqrt{2} & 0\end{pmatrix}$$

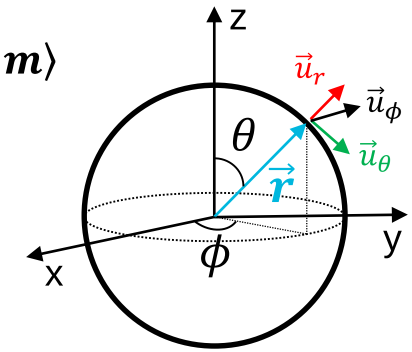
$$\hat{J}_y = \frac{\hbar}{2i}\begin{pmatrix}0 & -\sqrt{2} & 0\\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2}\\ 0 & \sqrt{2} & 0\end{pmatrix}$$

IMT Atlantique
Bretagne-Pays de la Loire
École Mines-Télécom

MOMENT CINÉTIQUE ORBITAL - HARMONIQUES SPHÉRIQUES (i)

On se place en coordonnées sphériques et on considère la base propre $|\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}\rangle$ commune aux opérateurs $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ et $\hat{\boldsymbol{L}}_{\boldsymbol{z}}$ du moment cinétique orbital $\vec{L}$:

$$\begin{cases} \hat{\boldsymbol{L}}^2\,|\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}\rangle = \boldsymbol{l}(\boldsymbol{l}+\mathbf{1})\,\hbar^{\mathbf{2}}\,|\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}\rangle \\ \hat{\boldsymbol{L}}_{\boldsymbol{z}}\,|\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}\rangle = \mathbf{m}\,\hbar\,|\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}\rangle \end{cases}$$



$$\hat{L} = \hat{R}\times\hat{P} = -i\hbar\hat{R}\times\vec{\nabla}_{r\theta\phi}$$

$$\left(\vec{\nabla}_{r\theta\phi} = \frac{\partial}{\partial r}\vec{u}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\vec{u}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\vec{u}_\phi\right)$$

$$\hat{L} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\vec{u}_\phi - \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\vec{u}_\theta\right)$$

$$\begin{cases} \hat{\boldsymbol{L}}_{\boldsymbol{x}} = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ \hat{\boldsymbol{L}}_{\boldsymbol{y}} = -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ \hat{\boldsymbol{L}}_{\boldsymbol{z}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \quad \text{et} \quad \hat{\boldsymbol{L}}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \end{cases}$$

$\hat{L}$ ne dépend que de (θ,ϕ) et $\hat{\boldsymbol{L}}_{\boldsymbol{z}}$ que de (ϕ) $\Rightarrow$ séparation des variables pour la fonction d'onde $\quad Y_{l,m}(\theta,\phi) = \Theta_{l,m}(\theta)\psi_m(\phi)$

$$\hat{L}_z Y_{l,m}(\theta,\phi) = \mathrm{m}\,\hbar Y_{l,m}(\theta,\phi) \Rightarrow \frac{\partial}{\partial\phi}\psi_m + \frac{m}{i}\psi_m = 0 \Rightarrow \psi_m(\phi) = \mathrm{A}\,e^{im\phi}$$

Normalizing condition:

$$\int_0^{2\pi} d\phi|\psi_m|^2 = 1 \;\Rightarrow\; \mathrm{A} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$\boldsymbol{\psi_m(\phi)}$ doit être $\boldsymbol{2\pi}$-périodique, $\boldsymbol{\psi_m(\phi+2\pi) = \psi_m(\phi)} \;\Rightarrow\; \boldsymbol{m \in \mathbb{N}}$

Et comme $m = \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$, $\boldsymbol{l}$ doit aussi être entier

$$\boxed{Y_{l,m}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\Theta_{l,m}(\theta)e^{im\phi}}$$

MOMENT CINÉTIQUE ORBITAL - HARMONIQUES SPHÉRIQUES (ii)

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\Theta_{l,m}(\theta)e^{im\phi}$$

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2\,\Psi_{l,m} = \hbar^2 \boldsymbol{l}(\boldsymbol{l}+\mathbf{1})\,\Psi_{l,m}$$

Equation de Legendre

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\,\frac{d\Theta_{l,m}}{d\theta}\right) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta_{l,m} = 0$$

Solutions sous forme de polynômes de Legendre $\mathrm{P}_l^{(m)}(X)$: $\Theta_{l,m}(\theta) = C_{l,m}\;\mathrm{P}_l^{(m)}(\cos\theta)$

$$\mathrm{P}_l^{(m)}(X) = (1-X^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{dX^{|m|}}P_l(X)$$

avec $P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l$

Condition de normalisation $\langle l', m' \,|l, m\rangle = \boldsymbol{\delta_{ll'}\delta_{mm'}}$

$$\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, \frac{|C_{l,m}|^2}{2\pi}\left|\mathrm{P}_l^{(m)}(\cos\theta)\right|^2 = 1 \;\Rightarrow\; C_{l,m} = (-1)^{|m|}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$$

$$\mathrm{P}_0^{(0)}(\theta) = 1$$
$$\mathrm{P}_1^{(0)}(x) = \cos\theta\;;\;\mathrm{P}_1^{(1)}(x) = \sin\theta$$
$$\mathrm{P}_2^{(0)}(x) = \tfrac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)\;;\;\mathrm{P}_2^{(1)}(x) = \tfrac{3}{2}\sin 2\theta\;;\;\mathrm{P}_2^{(2)}(x) = 3\sin^2\theta$$

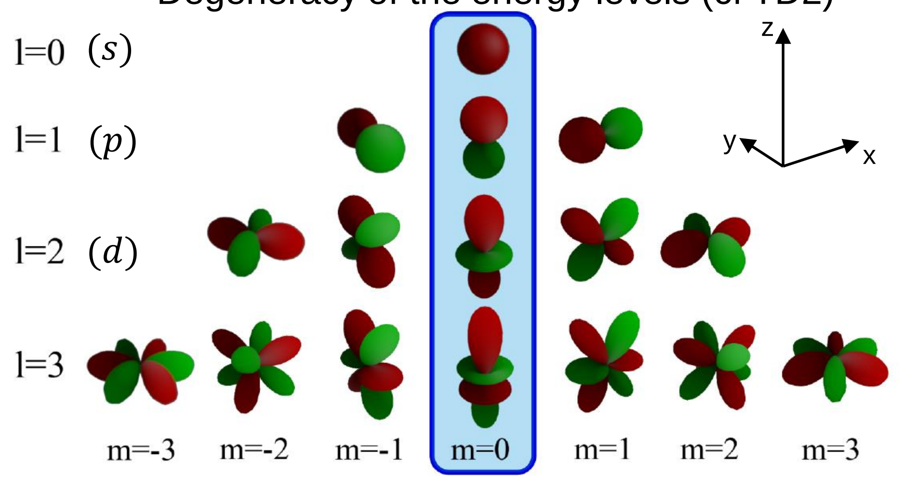
Conclusion: Fonctions d'onde propres communes à $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$ sous forme d'harmoniques sphériques

$$\boxed{Y_{l,m}(\theta,\phi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,\mathrm{P}_l^{(m)}(\cos\theta)\;e^{im\phi}}$$

($\boldsymbol{l} \in \mathbb{N}$, et $m = \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$)

Nombre impaire d'états liés au moment cinétique orbital

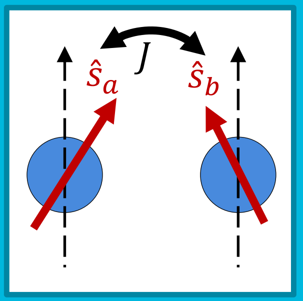
Degeneracy of the energy levels (cf TD2)



IMT Atlantique
Bretagne-Pays de la Loire
École Mines-Télécom

UEE - D
MÉCANIQUE QUANTIQUE:
MOMENTS CINÉTIQUES EN MÉCANIQUE QUANTIQUE

CM2- MOMENT CINÉTIQUE DE SPIN ET COMPOSITION DE MOMENTS



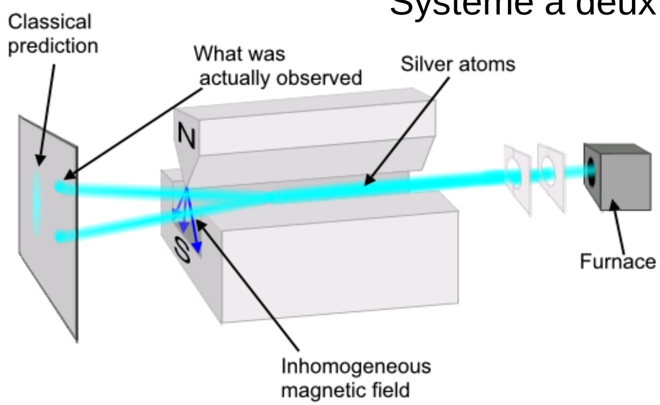
Vincent Vlaminck
Vincent.vlaminck@imt-atlantique.fr
Dpt. MO

NÉCESSITÉ D'UN MOMENT CINÉTIQUE SUPPLÉMENTAIRE

Expérience de Stern & Gerlach (1922)

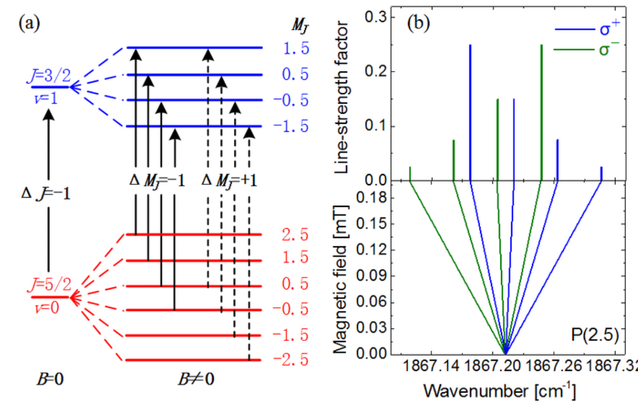
2 taches symétriques dont la séparation est $\propto \vec{B}$

Système à deux états



Effet Zeeman « anormal »

Nombres pairs de raies sous champ $\vec{B}$

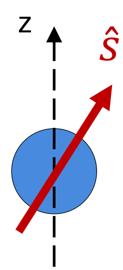


incompatible avec un nombre impaire d'états issus du moment cinétique orbital

Nécessité d'introduire un nouveau moment cinétique propre à chaque particule, **le spin $\hat{S}$**, en plus de leur moment cinétique orbital.

(Postulat de Goudsmit and Uhlenbeck (1925))

- L'origine du spin est purement quantique et ne dépend pas des coordonnées d'espace.
- Facteur $g_s \approx 2$ supplémentaire dans le rapport gyromagnétique de l'électron $\vec{\mu}_s = -g_s \dfrac{e}{2m}\vec{S}$



- Valeur demi-entière du spin pour l'électron, proton et neutron ($S=\frac{1}{2}$).
- $\hat{S}_z$ admet deux valeurs propres $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$
- Le photon aussi possède un spin S=1

DESCRIPTION THÉORIQUE - MATRICES DE PAULI

Contrairement au moment orbital $\hat{L}$, le moment cinétique de spin $\hat{S}$ ne peut pas être décrit par un opérateur différentiel (ne dépend pas des coordonnées d'espace). Le spin est représenté par un opérateur vectoriel $\vec{\hat{\boldsymbol{S}}} = (\hat{\boldsymbol{S}}_x, \hat{\boldsymbol{S}}_y, \hat{\boldsymbol{S}}_z)$ dont les composantes vérifient les même relations de commutation: $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$; $[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x$; $[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$

De même, $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ et $\hat{\boldsymbol{S}}_z$ commutent, et ont une base propre commune $|\boldsymbol{s}, \boldsymbol{m_s}\rangle$ dans laquelle:

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2 \, |\boldsymbol{s}, \boldsymbol{m_s}\rangle = \boldsymbol{s}(\boldsymbol{s}+\mathbf{1}) \, \hbar^{\mathbf{2}} \, |\boldsymbol{s}, \boldsymbol{m_s}\rangle \quad ; \quad \hat{\boldsymbol{S}}_z \, |\boldsymbol{s}, \boldsymbol{m_s}\rangle = \boldsymbol{m_s}\hbar \, |\boldsymbol{s}, \boldsymbol{m_s}\rangle \quad \text{tel que} \quad \boldsymbol{m_s} = \{-\boldsymbol{s}, -\boldsymbol{s}+\mathbf{1}, \dots, \boldsymbol{s}-\mathbf{1}, \boldsymbol{s}\}$$

et $\hat{\boldsymbol{S}}_\pm |\boldsymbol{s}, \boldsymbol{m_s}\rangle = \hbar\sqrt{\left(s(s+1) - \boldsymbol{m_s}(\boldsymbol{m_s} \pm 1)\right)} \, |\boldsymbol{s}, \boldsymbol{m_s} \pm \mathbf{1}\rangle$ avec $\hat{\boldsymbol{S}}_\pm = \hat{\boldsymbol{S}}_x \pm \boldsymbol{i} \, \hat{\boldsymbol{S}}_y$

Dans le cas d'un système de spin-1/2 $\left| s = \frac{1}{2}, m_s = \pm\frac{1}{2} \right\rangle$, on utilise les notations $|\pm\rangle$ pour les deux états propres $\left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle$, qui correspondent aux vecteurs 2D (**spineur**): $|+\rangle = \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$ et $|-\rangle = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{1} \end{pmatrix}$, et on décrit les opérateurs $\hat{\boldsymbol{S}}_k$ à partir des matrices de Pauli $\boldsymbol{\sigma_k}$:

$$\boldsymbol{\sigma_x} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\sigma_y} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\boldsymbol{i} \\ \boldsymbol{i} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\sigma_z} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix} \quad \text{tel que} \quad \boxed{\hat{\boldsymbol{S}}_k = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma_k}}$$

qui vérifient les propriétés: *(i)* $\sigma_k^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ *(ii)* $\sigma_k\sigma_j + \sigma_j\sigma_k = 0 \ (j \neq k)$ *(iii)* $[\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] = 2i\varepsilon_{jkl}\hat{\sigma}_l$

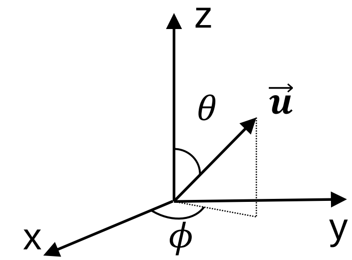
Rq: Comme $\hat{S}$ ne dépend pas des coordonnées d'espace, il commute avec les opérateurs $\hat{r}$, $\hat{p}$, $\hat{L}$, et la fonction d'onde totale et le produit d'un terme spatial et un terme de spin

- $[\hat{S}_j, \hat{r}_k] = [\hat{S}_j, \hat{p}_k] = [\hat{S}_j, \hat{L}_k] = 0 \quad (j,k) = (x,y,z)$
- $\Psi_{n,l,m,s,m_s}(\vec{r}) = \psi_{n,l,m}(\vec{r}) \ |\boldsymbol{s}, \boldsymbol{m_s}\rangle$

PRÉPARATION D'UN ÉTAT DE SPIN et MESURE DE SPIN

On suppose qu'un état de spin est arbitrairement préparé dans la direction $\vec{\boldsymbol{u}} = \sin\theta\cos\phi\,\vec{\boldsymbol{u}}_x + \sin\theta\sin\phi\,\vec{\boldsymbol{u}}_y + \cos\theta\,\vec{\boldsymbol{u}}_z$

L'opérateur $\widehat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{u}}$ associé à cet état de spin s'écrit dans la base propre de $\widehat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{z}}$ $\{|+\rangle, |-\rangle\}$:



$$\widehat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{u}} = \hat{S}.\vec{u} = \sin\theta\cos\phi\,\widehat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{x}} + \sin\theta\sin\phi\,\widehat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{y}} + \cos\theta\,\widehat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{z}} = \frac{\hbar}{\mathbf{2}}\begin{pmatrix} \cos\boldsymbol{\theta} & \sin\boldsymbol{\theta}\,\boldsymbol{e}^{-\boldsymbol{i\phi}} \\ \sin\boldsymbol{\theta}\,\boldsymbol{e}^{\boldsymbol{i\phi}} & -\cos\boldsymbol{\theta} \end{pmatrix}$$

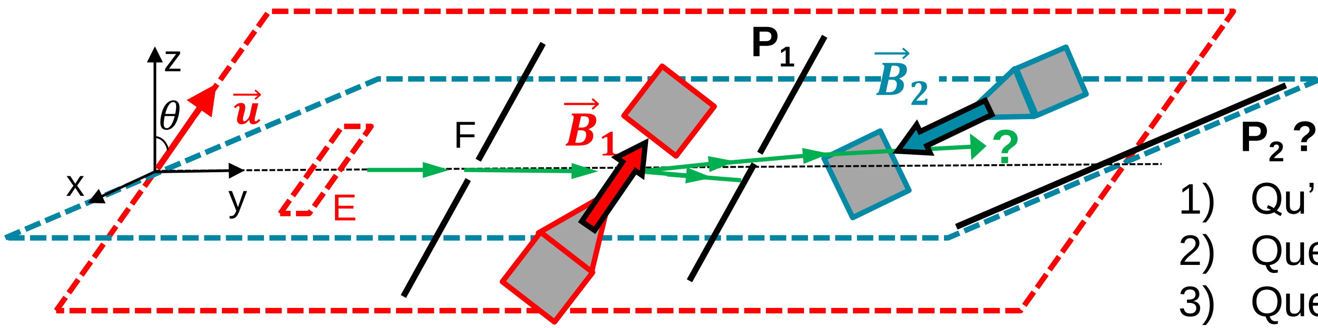
Les états propres de $\widehat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{u}}$ s'écrivent:

$$|+\rangle_u = \cos\frac{\theta}{2}\,\boldsymbol{e}^{-\boldsymbol{i}\frac{\boldsymbol{\phi}}{2}}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,\boldsymbol{e}^{\boldsymbol{i}\frac{\boldsymbol{\phi}}{2}}|-\rangle$$

$$|-\rangle_u = -\sin\frac{\theta}{2}\,\boldsymbol{e}^{-\boldsymbol{i}\frac{\boldsymbol{\phi}}{2}}|+\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\,\boldsymbol{e}^{\boldsymbol{i}\frac{\boldsymbol{\phi}}{2}}|-\rangle$$

Mesure de spin: $\vec{B}_1 \parallel \vec{\boldsymbol{u}}$ $(\vec{u} \in (xOz))$ → un seul état de spin $|+\rangle_u$ conservé après P1 → $\vec{B}_2 \parallel \vec{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{x}}$

(Stern et Gerlach)

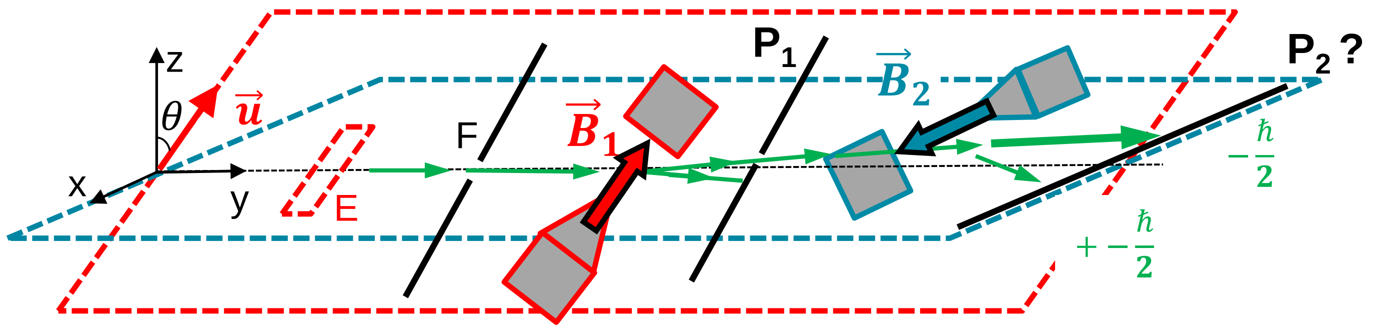


1) Qu'est qu'on observe sur l'écran P_2?
2) Quel est le résultat de la mesure de S_x?
3) Quelles sont les probabilités associées aux différentes mesures de S_x
4) Quel est la valeur moyenne de $\langle S_x \rangle$?

MESURE DE SPIN - EXP° STERN et GERLACH

Mesure de spin: $\vec{B}_1 \parallel \vec{\boldsymbol{u}}$ $(\vec{u} \in (xOz),\ \phi = 0)$ → un seul état de spin $|+\rangle_u$ conservé après P1 → $\vec{B}_2 \parallel \vec{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{x}}$

1) Qu'est qu'on observe sur l'écran P_2? → **deux taches d'intensité différente**



2) Quel est le résultat de la mesure de S_x?

→ $\boldsymbol{S_x = \pm\frac{\hbar}{2}}$

3) Quelles sont les probabilités associées aux différentes mesures de S_x? (on doit avoir $\mathcal{P}\left(+\frac{\hbar}{2}\right) + \mathcal{P}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = 1$)

Après P_1, les particules sont dans l'état $|+\rangle_u = -i\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + i\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle$.

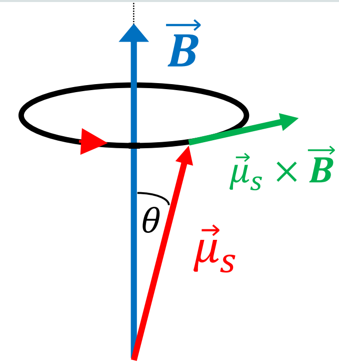
Les probabilités associés aux mesures $\pm\frac{\hbar}{2}$ correspondant aux états $|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm |-\rangle)$:

$$\mathcal{P}\left(+\frac{\hbar}{2}\right) = \left|{}_x\langle + | + \rangle_u\right|^2 = \left|\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-i\cos\frac{\theta}{2}\\ i\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}\right|^2 = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}+\frac{\pi}{4}\right) \qquad \mathcal{P}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \left|{}_x\langle - | + \rangle_u\right|^2 = \sin^2\left(\frac{\theta}{2}+\frac{\pi}{4}\right)$$

4) Quel est la valeur moyenne de $\langle S_x\rangle$?

$$\langle S_x\rangle = {}_u\langle + |\hat{S}_x| + \rangle_u = \begin{pmatrix}-i\cos\frac{\theta}{2} & i\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \frac{\hbar}{2}\\ \frac{\hbar}{2} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-i\cos\frac{\theta}{2}\\ i\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sin\theta$$

PRÉCESSION LARMOR (i)

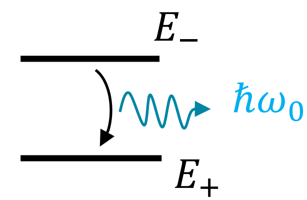


A toute particule possédant un spin S est associé un moment magnétique proportionnel à S:

$$\vec{\mu}_s = \gamma \vec{S} \qquad (\gamma\text{=rapport gyromagnétique})$$

En présence d'un champ magnétique $\vec{\boldsymbol{B}}$, le moment magnétique de la particule est soumis à un couple $\vec{\mu}_s \times \vec{\boldsymbol{B}}$ qui lui impose un **mouvement de précession**. L'énergie associée à ce couple est donné par: $E_s = -\vec{\mu}_s.\vec{\boldsymbol{B}} = -\gamma\vec{S}.\vec{\boldsymbol{B}}$

On considère une particule de spin ½ au repos dans un état de spin quelconque $|\psi(0)\rangle_u = \cos\frac{\theta}{2}\boldsymbol{e}^{-i\frac{\boldsymbol{\phi}}{2}}|+\rangle \; + \; \sin\frac{\theta}{2}\boldsymbol{e}^{i\frac{\boldsymbol{\phi}}{2}}|-\rangle$ en présence d'un champ magnétique $\vec{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{B_0}\,\vec{u}_{\boldsymbol{z}}$ à t=0.



L'Hamiltonien lié à la particule s'écrit: $\widehat{H} = -\gamma B_0 \hat{S}_z = -\gamma B_0 \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

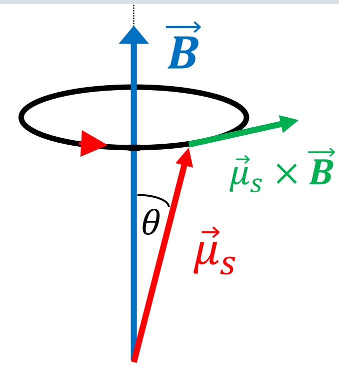
Dont les valeurs propres sont $E_\pm = \mp\gamma B_0\frac{\hbar}{2}$. On note $\omega_0 = \gamma B_0$ la fréquence de Larmor qui correspond aux transitions entre les deux états $E_\pm$. Comme l'Hamiltonien est indépendant du temps, l'équation de Schrödinger s'écrit: $i\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \widehat{H}|\psi(t)\rangle$.

A un instant t, la fonction d'onde s'écrit: $|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\boldsymbol{e}^{-i\frac{\boldsymbol{\phi}}{2}}\boldsymbol{e}^{-i\frac{\boldsymbol{E_+t}}{\hbar}}|+\rangle \; + \; \sin\frac{\theta}{2}\boldsymbol{e}^{i\frac{\boldsymbol{\phi}}{2}}\boldsymbol{e}^{-i\frac{\boldsymbol{E_-t}}{\hbar}}|-\rangle$

$$\Longrightarrow \quad |\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{t})\rangle = \boldsymbol{\cos}\frac{\boldsymbol{\theta}}{\boldsymbol{2}}\boldsymbol{e}^{-i\frac{\boldsymbol{\phi}+\boldsymbol{\omega_0 t}}{\boldsymbol{2}}}|+\rangle \; + \; \boldsymbol{\sin}\frac{\boldsymbol{\theta}}{\boldsymbol{2}}\boldsymbol{e}^{i\frac{\boldsymbol{\phi}+\boldsymbol{\omega_0 t}}{\boldsymbol{2}}}|-\rangle \qquad \begin{cases} \theta(t) = \theta_0 = Cte \\ \phi(t) = \phi_0 + \omega_0 t \end{cases}$$

1) **Quel est le résultat d'une mesure de S_z?**
2) **Quelles sont les valeurs moyennes de $\langle\widehat{S}_z\rangle, \langle\widehat{S}_x\rangle$, et $\langle\widehat{S}_y\rangle$?**

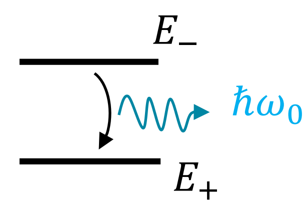
PRÉCESSION LARMOR (ii)



Etat à un instant t: $|\psi(t)\rangle = cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\phi+\omega_0 t}{2}}|+\rangle \; + \; sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\phi+\omega_0 t}{2}}|-\rangle$

1) Quel est le résultat d'une mesure de S_z?

$$\begin{cases} +\frac{\hbar}{2} \text{ avec une probabilité } \mathcal{P}\left(+\frac{\hbar}{2}\right) = \left|\langle + | \psi(t)\rangle\right|^2 = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ -\frac{\hbar}{2} \text{ avec une probabilité } \mathcal{P}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \left|\langle - | \psi(t)\rangle\right|^2 = \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{cases}$$



2) Quelles sont les valeurs moyennes de $\langle \hat{S}_z\rangle$, $\langle \hat{S}_x\rangle$, et $\langle \hat{S}_y\rangle$?

$$\langle \hat{S}_z\rangle = \langle\psi(t)|\hat{S}_z|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\phi+\omega_0 t}{2}} & sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\phi+\omega_0 t}{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\phi+\omega_0 t}{2}} \\ sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\phi+\omega_0 t}{2}}\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\cos\theta$$

Independent du temps $\hat{H}$ et $\hat{S}_z$ commutent. $\hat{S}_z$ est une constante du mouvement

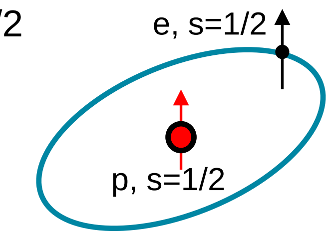
$$\langle \hat{S}_x\rangle = \langle\psi(t)|\hat{S}_x|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\theta \; \cos(\phi+\omega_0 t)$$

$$\langle \hat{S}_y\rangle = \langle\psi(t)|\hat{S}_y|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\theta \; \sin(\phi+\omega_0 t)$$

Les valeurs moyennes de $\hat{S}_x$ et $\hat{S}_y$ dépendent du temps

Théorème d'Ehrenfest:
$\hat{H}$ ne commute pas avec $\hat{S}_x$ et $\hat{S}_y$

COMPOSITION DE MOMENT CINÉTIQUE – ATOME D'Hydrogène



Considérons l'exemple de l'atome d'hydrogène, e.g. système de deux particules (e-,p+) de spin 1/2
On néglige dans un premier temps le couplage entre $\vec{s}_e$ et $\vec{s}_p$ ($\hat{S}_e$ et $\hat{S}_p$ commutent).
Le moment cinétique total de spin de l'atome d'H, $\hat{S} = \hat{S}_e + \hat{S}_p$ donne 4 états propres de $\hat{S}_z$:

$$\hat{S}_z\chi_e\chi_p = \hat{S}_z^e\chi_e\chi_p + \chi_e\hat{S}_z^p\chi_p = \hbar(\boldsymbol{m_e} + \boldsymbol{m_s})\chi_e\chi_p \Rightarrow \underset{m=1}{\overset{\uparrow\uparrow}{ep}},\ \underset{m=0}{\overset{\uparrow\downarrow}{ep}},\ \underset{m=0}{\overset{\downarrow\uparrow}{ep}},\ \underset{m=-1}{\overset{\downarrow\downarrow}{ep}}$$

En réalité, on a un triplet d'état avec $S_T = 1$ et un singlet $S_T = 0$ qu'on note selon $|\boldsymbol{s}, \boldsymbol{m_s}\rangle$:

$$S_T = 1 \text{ (triplet)} \begin{cases} |\mathbf{1},\mathbf{1}\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\mathbf{1},\mathbf{0}\rangle = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{2}}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\mathbf{1},-\mathbf{1}\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad ; \quad S_T = 0 \text{ (singlet)} \left\{ |\mathbf{0},\mathbf{0}\rangle = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{2}}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \right.$$

Démo: On doit montrer que les triplets sont états propres de $\hat{S}^2 = \hat{S}_e^2 + \hat{S}_p^2 + 2\hat{S}_e.\hat{S}_p$ avec valeurs propres $\mathbf{2}\boldsymbol{\hbar}^{\mathbf{2}}$, et le singlet est état propre de $\hat{S}^2$ avec valeurs propres 0. Par définition, on a $\hat{S}_e^2|\boldsymbol{s},\boldsymbol{m_s}\rangle = \hat{S}_p^2|\boldsymbol{s},\boldsymbol{m_s}\rangle = \frac{3}{4}\boldsymbol{\hbar}^{\mathbf{2}}|\boldsymbol{s},\boldsymbol{m_s}\rangle$, et on observer que:

$$\hat{S}_e.\hat{S}_p|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\left(2|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle\right) \text{ et } \hat{S}_e.\hat{S}_p|\downarrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4}(2|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \Rightarrow \hat{S}_e.\hat{S}_p|\mathbf{1},\mathbf{0}\rangle = \frac{\boldsymbol{\hbar}^{\mathbf{2}}}{\mathbf{4}}|\mathbf{1},\mathbf{0}\rangle \text{ et } \hat{S}_e.\hat{S}_p|\mathbf{0},\mathbf{0}\rangle = -\frac{\mathbf{3}\boldsymbol{\hbar}^{\mathbf{2}}}{\mathbf{4}}|\mathbf{0},\mathbf{0}\rangle$$

D'où: $\hat{S}^2|\mathbf{1},\mathbf{0}\rangle = \left(\frac{3}{4}\boldsymbol{\hbar}^{\mathbf{2}} + \frac{3}{4}\boldsymbol{\hbar}^{\mathbf{2}} + \frac{2}{4}\boldsymbol{\hbar}^{\mathbf{2}}\right)|\mathbf{1},\mathbf{0}\rangle = \mathbf{2}\boldsymbol{\hbar}^{\mathbf{2}}|\mathbf{1},\mathbf{0}\rangle$ et $\hat{S}^2|\mathbf{0},\mathbf{0}\rangle = \left(\frac{3}{4}\boldsymbol{\hbar}^{\mathbf{2}} + \frac{3}{4}\boldsymbol{\hbar}^{\mathbf{2}} - \mathbf{2} * \frac{3}{4}\boldsymbol{\hbar}^{\mathbf{2}}\right)|\mathbf{0},\mathbf{0}\rangle = \mathbf{0}$ *(cqfd)*

On a négligé le moment cinétique orbital de l'électron, pour un atome d'hydrogène dans un état quelconque $\psi_{n,l,m,s}$, le moment cinétique total de l'électron est $\hat{J}_e = \hat{L}_e + \hat{S}_e$, et peut prendre les valeurs $l + \frac{1}{2}$ ou $l - \frac{1}{2}$, et donc le moment cinétique total de l'atome sera soit $\{l-1;\, l\,;\, l+1\}$.

COMPOSITION DE MOMENT CINÉTIQUE – CAS GÉNÉRAL

Dans le cas général où l'on combine deux moments cinétique $\hat{J}_1$ et $\hat{J}_2$, le moment cinétique total $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$ peut prendre les valeurs:

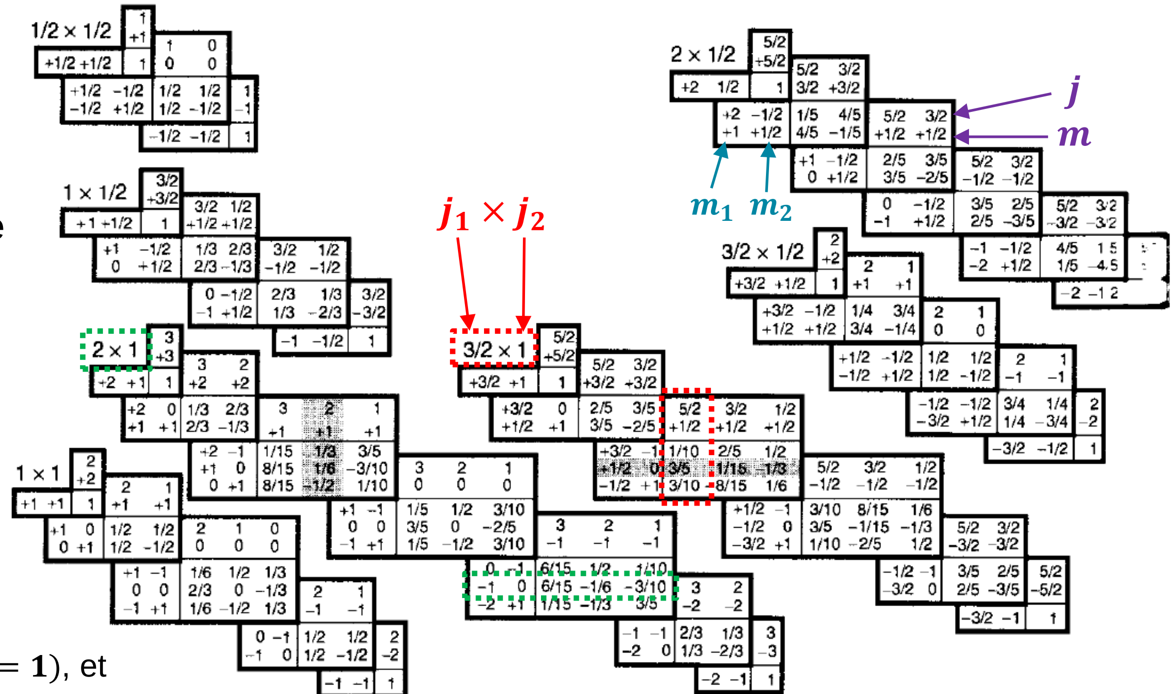
$$\boldsymbol{j} = \{(\boldsymbol{j_1} + \boldsymbol{j_2})\,;(\boldsymbol{j_1} + \boldsymbol{j_2} - \mathbf{1})\,;\,...\,;|\boldsymbol{j_1} - \boldsymbol{j_2}|\}$$

Les états combinés $|\boldsymbol{j}, \boldsymbol{m}\rangle$ de moments total ($\boldsymbol{j}$) et de composante$-z$ ($\boldsymbol{j_z} = \boldsymbol{m}$) sont des combinaisons linéaires de compositions d'états $|\boldsymbol{j_1}, \boldsymbol{m_1}\rangle\,|\boldsymbol{j_2}, \boldsymbol{m_2}\rangle$:

$$|\boldsymbol{j}, \boldsymbol{m}\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C^{\boldsymbol{j_1 j_2}}_{\boldsymbol{m_1, m_2}}\,|\boldsymbol{j_1}, \boldsymbol{m_1}\rangle\,|\boldsymbol{j_2}, \boldsymbol{m_2}\rangle$$

Les $C^{\boldsymbol{j_1 j_2}}_{\boldsymbol{m_1, m_2}}$ sont données par les coefficients de **Clebsch-Gordon**

Coefficients de Clebsch-Gordon



Exemple 1:

Deux particules au repos respectivement de spin ($\boldsymbol{j_1} = \frac{\mathbf{3}}{\mathbf{2}}$, $\boldsymbol{j_2} = \mathbf{1}$), et ayant pour spin total ($j = \frac{\mathbf{5}}{\mathbf{2}}$) et comme composante selon z ($\boldsymbol{j_z} = +\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}$) donne lieu à la superposition d'états:

$$\left|\frac{\mathbf{5}}{\mathbf{2}}, \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}\left|\frac{\mathbf{3}}{\mathbf{2}}, \frac{\mathbf{3}}{\mathbf{2}} > |\mathbf{1}, -\mathbf{1}\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}}\right|\frac{\mathbf{3}}{\mathbf{2}}, \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}} > |\mathbf{1}, \mathbf{0}\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}}\left|\frac{\mathbf{3}}{\mathbf{2}}, -\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}} > |\mathbf{1}, \mathbf{1}\rangle\right.$$

La mesure de $\hat{S}_z^{(1)}$ donnera soit $\frac{\mathbf{3}}{\mathbf{2}}\hbar$ avec la probabilité $\frac{1}{10}$, soit $\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\hbar$ avec la probabilité $\frac{3}{5}$, soit $-\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\hbar$ avec la probabilité $\frac{3}{10}$

Exemple 2:

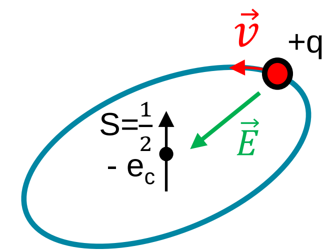
Deux particules au repos respectivement dans des états de spin connus $|\boldsymbol{j_1}, \boldsymbol{m_1}\rangle = |\mathbf{2}, -\mathbf{1}\rangle$ et $|\boldsymbol{j_2}, \boldsymbol{m_2}\rangle = |\mathbf{1}, \mathbf{0}\rangle$ pour 2, auront obligatoirement un valeur de $m = m_1 + m_2 = -1$ et donne lieu à la superposition d'états:

$$|\mathbf{2}, -\mathbf{1}\,\rangle\,|\mathbf{1}, \mathbf{0}\rangle = \sqrt{\frac{6}{15}}|\mathbf{3}, -\mathbf{1}\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}}|\mathbf{2}, -\mathbf{1}\rangle - \sqrt{\frac{3}{10}}|\mathbf{1}, -\mathbf{1}\rangle$$

La mesure du spin total $\hat{S}$ donnera soit $\mathbf{3}\hbar$ avec la probabilité $\frac{6}{15}$, soit $\mathbf{2}\hbar$ avec la probabilité $\frac{1}{6}$, soit $\hbar$ avec la probabilité $\frac{3}{10}$

COUPLAGE SPIN ORBITE – STRUCTURE FINE

Moment cinétique orbitale $\hat{L}_e$ et moment de spin $\hat{S}_e$ faiblement couplés (Couplage Spin-Orbit)



Effet relativiste: dans le référentiel de l'électron, le noyau chargé en « mouvement » constitue un courant ⇒ l'électron expérience un champ magnétique:

$$\vec{B}_{SO} = \frac{1}{c^2}\vec{E} \times \vec{v} = -\frac{1}{rc^2}\frac{\partial V}{\partial r}\vec{r} \times \vec{v} = -\frac{1}{rmc^2}\frac{\partial V}{\partial r}\vec{L}$$

Le spin de l'électron interagit avec $\vec{B}_{SO}$ qui donne un terme supplémentaire dans l'Hamiltonien:

$$\widehat{H}_{SO} = -\frac{1}{2}\vec{\mu}_s.\vec{B}_{SO} = \frac{\gamma}{rmc^2}\frac{\partial V}{\partial r}\vec{L}.\vec{S} \qquad (\vec{\mu}_s = \gamma\vec{S})$$

C'est le moment cinétique total $\hat{J}_e = \hat{L}_e + \hat{S}_e$ qui est conservé, non pas $\hat{L}_e$ ou $\hat{S}_e$ séparément.

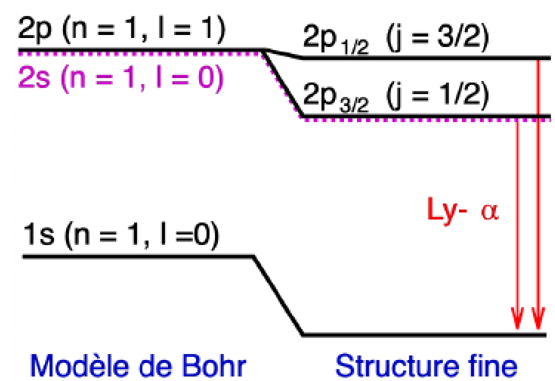
Comme $\hat{J}_e{}^2 = \hat{L}_e{}^2 + \hat{S}_e{}^2 + 2\,\hat{L}_e\,.\,\hat{S}_e$, et que $\widehat{H}_{SO} \propto \lambda\,\vec{L}.\vec{S}$, l'énergie moyenne du couplage spin-orbit s'écrit:

$$\langle\widehat{H}_{SO}\rangle \propto \frac{\lambda}{2}\,J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)$$

En l'**absence** de couplage spin-orbit, les états propre de $\hat{J}_e$ (multiplet de $(2S+1)(2L+1)$) dont les valeurs sont comprises entre $\{(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S})$; … ; $|\boldsymbol{L}-\boldsymbol{S}|\}$ sont **tous dégénérés.**

En **présence** de couplage **spin-orbit**, il y a **levée de dégénérescence** de ces multiplets en niveaux de structure fine suivant la valeur de J:

$$\Delta E = E(J) - E(J-1) = \lambda\,J$$



Exemple: Dédoublement de la raie d'émission jaune du Sodium (Na) en deux raies respectivement à 589,0 nm et 589,6 nm.