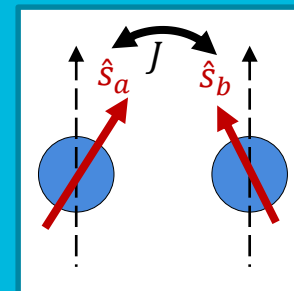




IMT Atlantique
Bretagne-Pays de la Loire
École Mines-Télécom

UEE - D MÉCANIQUE QUANTIQUE

MOMENTS CINÉTIQUES EN MÉCANIQUE QUANTIQUE



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

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

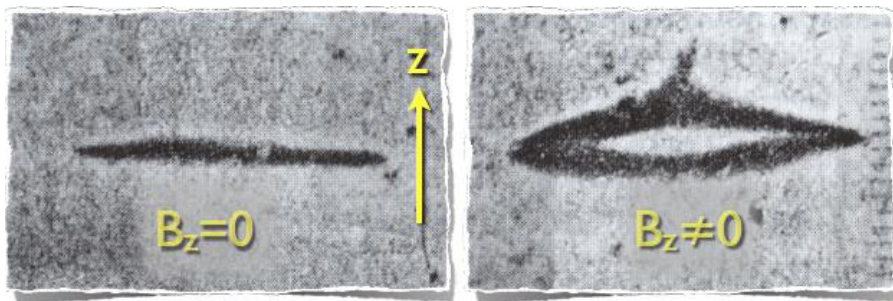
INTRODUCTION: EXPÉRIENCE DE STERN & GERLACH (1922)

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

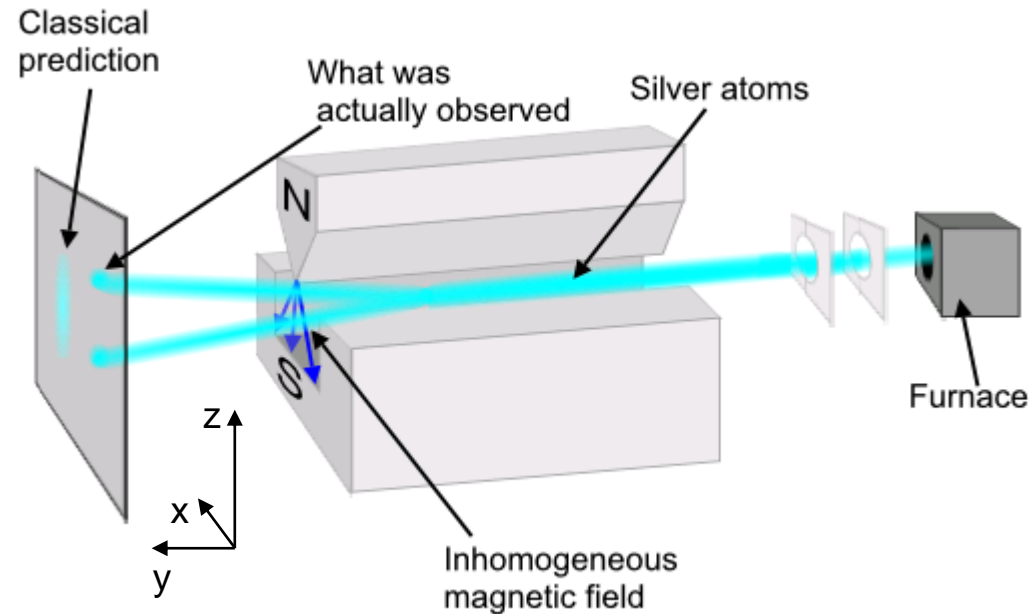
Fort gradient selon z ($\frac{\partial B}{\partial z} \gg \frac{\partial B}{\partial x}, \frac{\partial B}{\partial y}$) \Rightarrow Force magnétique sur les moments $\vec{\mu}$ des atomes d'Ag:

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

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



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



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

$$\mu_z = \pm \mu$$

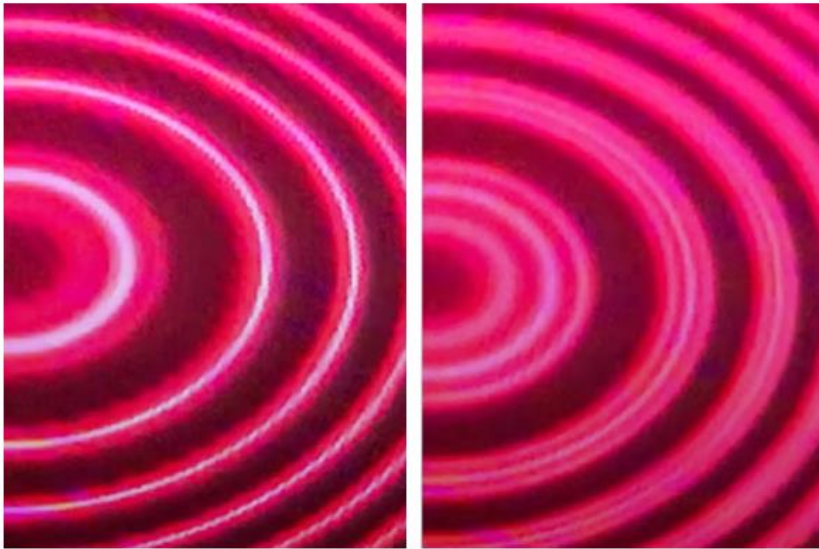
**Systeme à deux états,
Le moment magnétique est quantifié**

INTRODUCTION: EFFET ZEEMAN (1896)

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

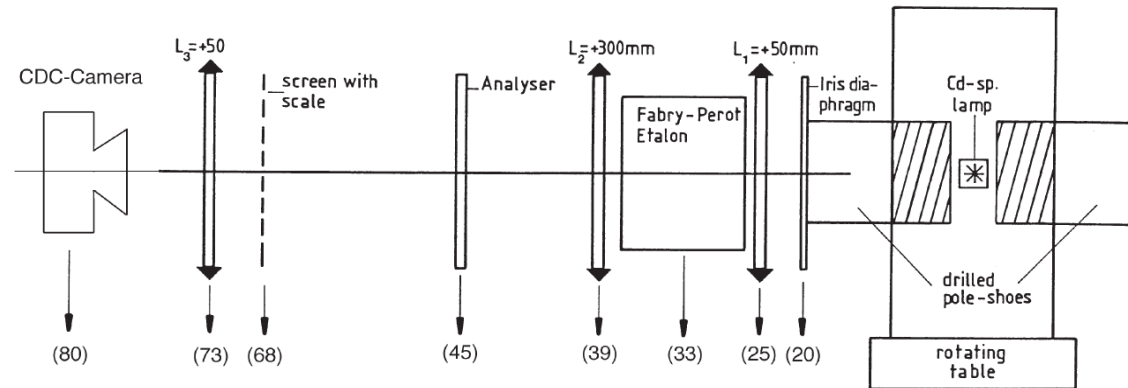
$B = 0$

$B \neq 0$



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

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



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

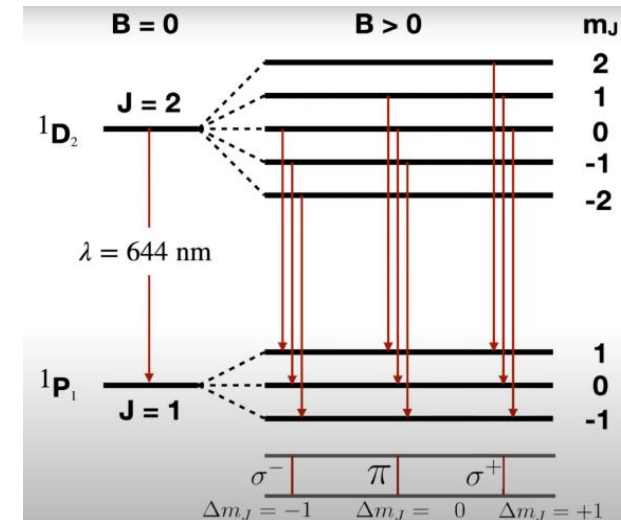
$$E_{mag} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

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

Magnéton de Bohr

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

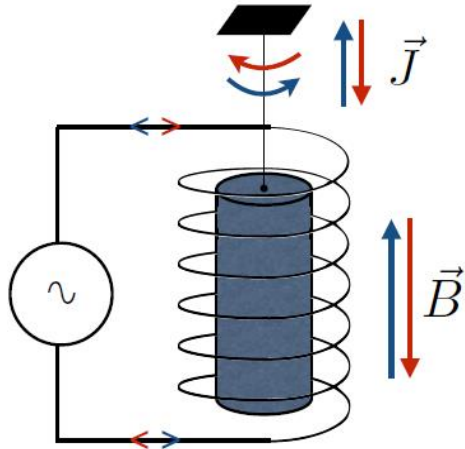
Quantification du moment magnétique en unité de μ_B



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=qFkWOPHhXcY>

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

+

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

$$\vec{J}_{magn} = \frac{\vec{\mu}}{\gamma} \quad \text{Rapport gyromagnétique:} \quad \gamma = \frac{ge}{2m}$$

➡ **Rotation due 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)

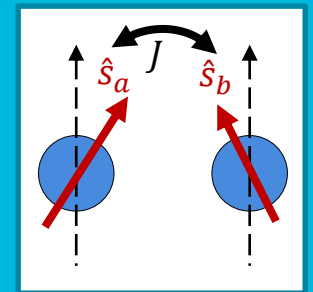


IMT Atlantique
Bretagne-Pays de la Loire
École Mines-Télécom

UEE - D

MÉCANIQUE QUANTIQUE: MOMENTS CINÉTIQUES EN MÉCANIQUE QUANTIQUE

CM1- OPÉRATEURS ASSOCIÉS AU MOMENT CINÉTIQUE



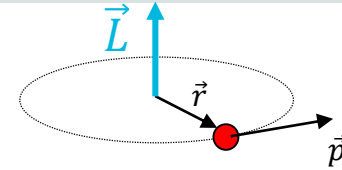
Vincent Vlamincq
Vincent.vlaminck@imt-atlantique.fr
Dpt. MO

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

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: $\delta\hat{L}_x \delta\hat{L}_y \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \rangle| = \frac{\hbar}{2} \langle \hat{L}_z \rangle$

Démo utilisant: $[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$
 $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$ et $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = 0$ ($i \neq j$)

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

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

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

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

$$\hat{J} \times \hat{J} = i\hbar\hat{J}$$

ETATS PROPRES D'UN OPÉRATEUR \hat{j}

Propriété:

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

Conséquence:

- Il est 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{j}^2 et la composante \hat{J}_z pour définir un état.

Démo:

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

Théorème:

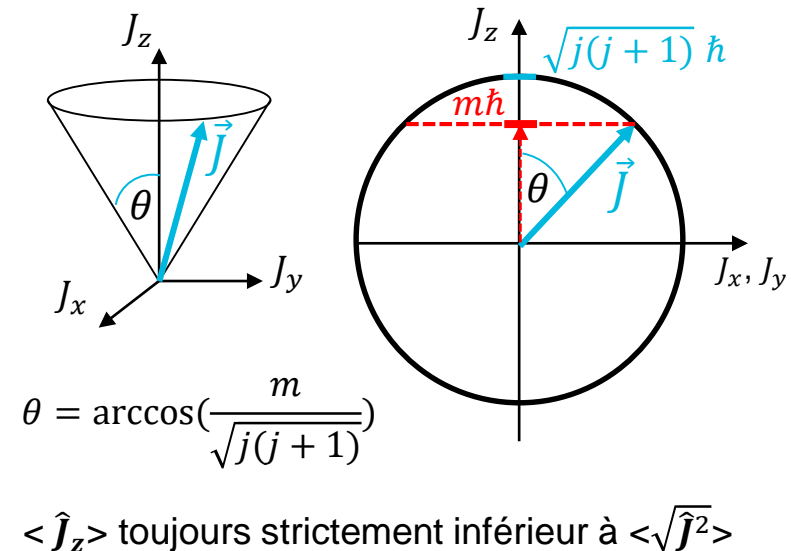
Les états propres d'un opérateur de moment cinétique \hat{j} notés $|j, m\rangle$ doivent satisfaire les propriétés suivantes:

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

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

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

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



DÉMONSTRATION DES ÉTATS PROPRES DE \hat{J}^2 et \hat{J}_z (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:

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

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 $|\alpha, \beta\rangle$?

$$\left. \begin{aligned} \hat{J}_z (\hat{J}_{\pm} |\alpha, \beta\rangle) &= (\hat{J}_{\pm} \hat{J}_z \pm \hbar \hat{J}_{\pm}) |\alpha, \beta\rangle = (\beta \pm 1)\hbar \hat{J}_{\pm} |\alpha, \beta\rangle \\ \hat{J}^2 (\hat{J}_{\pm} |\alpha, \beta\rangle) &= \hat{J}_{\pm} \hat{J}^2 |\alpha, \beta\rangle = \alpha\hbar^2 \hat{J}_{\pm} |\alpha, \beta\rangle \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\hat{J}_{\pm} |\alpha, \beta\rangle \text{ état propre de } \hat{J}_z \text{ et } \hat{J}^2 \text{ avec valeurs} \\ &\text{propres } (\beta \pm 1)\hbar \text{ et } \alpha\hbar^2 \text{ respectivement} \\ &\Rightarrow \hat{J}_{\pm} |\alpha, \beta\rangle = C_{\alpha, \beta}^{\pm} |\alpha, \beta \pm 1\rangle \end{aligned}$$

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

- β possède des limites supérieure β_{max} et inférieure β_{min} telles que:

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

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

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

$$\left. \begin{aligned} 0 = \hat{J}_- \hat{J}_+ |\alpha, \beta_{max}\rangle &= (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z) |\alpha, \beta_{max}\rangle = (\alpha - \beta^2 - \beta) \hbar^2 \implies \alpha = \beta_{max}(\beta_{max} + 1) \\ 0 = \hat{J}_+ \hat{J}_- |\alpha, \beta_{min}\rangle &= (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z) |\alpha, \beta_{min}\rangle = (\alpha - \beta^2 + \beta) \hbar^2 \implies \alpha = \beta_{min}(\beta_{min} - 1) \end{aligned} \right\} \beta_{max} = -\beta_{min}$$

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

On note par convention $\beta_{max} = j$ est entier ou demi-entier suivant la parité de n .

$2j + 1$ correspond aux nombre d'états possibles pour \hat{J}_z ,

et $-j \leq \beta = m \leq j$ traduit la projection sur l'axe z de \hat{J} .

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

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1) \hbar^2 |j, m\rangle$$

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = m \hbar |j, m\rangle$$

$$j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \text{ etc..}$$

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

(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{J} notés $|j, m\rangle$ vérifient

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

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

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

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

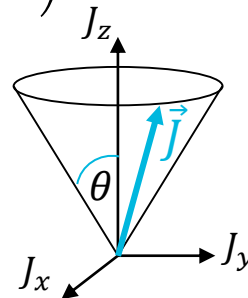
Conséquences:

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

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

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{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 $\hat{J}_\pm^3 = 0$.

Pour $j = 1$, trois valeurs possibles pour m : $-1, 0, +1$.

Les états propres communs à \hat{J}^2 et \hat{J}_z sont: $|1, -1\rangle$, $|1, 0\rangle$, $|1, 1\rangle$

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 $\hat{J}_\pm^3 = 0$.

Pour $j = 1$, trois valeurs possibles pour m : $-1, 0, +1$.

Les états propres communs à \hat{J}^2 et \hat{J}_z sont: $|1, -1\rangle$, $|1, 0\rangle$, $|1, 1\rangle$

$$\bullet \hat{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1) \hbar^2 |j, m\rangle \Rightarrow \hat{J}^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \bullet \hat{J}_z |j, m\rangle = m \hbar |j, m\rangle \Rightarrow \hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\bullet \hat{J}_\pm |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle \Rightarrow \hat{J}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \hat{J}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

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

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

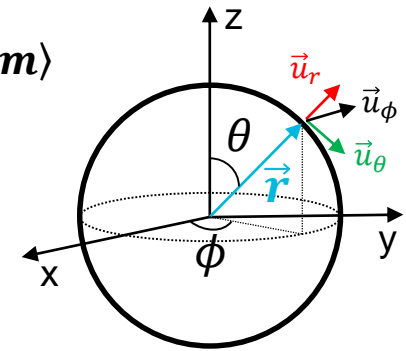
$$\Rightarrow \hat{J}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

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

MOMENT CINÉTIQUE ORBITAL - HARMONIQUES SPHÉRIQUES (i)

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

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



$$\begin{aligned} \hat{L} &= \hat{R} \times \hat{P} = -i\hbar \hat{R} \times \vec{\nabla}_{r\theta\phi} \\ (\vec{\nabla}_{r\theta\phi} &= \frac{\partial}{\partial r} \vec{u}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{u}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \vec{u}_\phi) \\ \hat{L} &= -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \vec{u}_\phi - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \vec{u}_\theta \right) \end{aligned} \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{L}_x = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_y = -i\hbar \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad \text{et} \quad \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \end{array} \right.$$

\hat{L} ne dépend que de (θ, ϕ)
et \hat{L}_z que de (ϕ)



séparation des variables
pour la fonction d'onde

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \Theta_{l,m}(\theta) \psi_m(\phi)$$

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

Normalizing condition:

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

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

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

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

MOMENT CINÉTIQUE ORBITAL - HARMONIQUES SPHÉRIQUES (ii)

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

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

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 $P_l^{(m)}(X)$

$$\Theta_{l,m}(\theta) = C_{l,m} P_l^{(m)}(\cos \theta)$$

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

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

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

$$\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{|C_{l,m}|^2}{2\pi} |P_l^{(m)}(\cos \theta)|^2 = 1 \Rightarrow C_{l,m} = (-1)^{|m|} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$$

$$P_0^{(0)}(\theta) = 1$$

$$P_1^{(0)}(x) = \cos \theta ; P_1^{(1)}(x) = \sin \theta$$

$$P_2^{(0)}(x) = \frac{1}{2}(3\cos^2 \theta - 1) ; P_2^{(1)}(x) = \frac{3}{2} \sin 2\theta ; P_2^{(2)}(x) = 3\sin^2 \theta$$

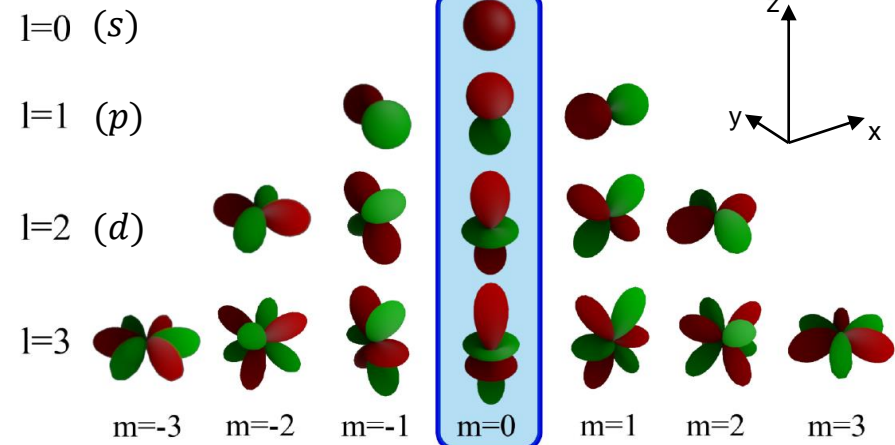
Conclusion: Fonctions d'onde propres communes à \hat{L}^2 et \hat{L}_z sous forme d'harmoniques sphériques

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

($l \in \mathbb{N}$, 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)



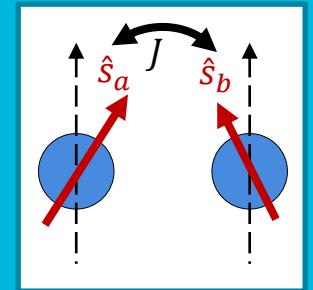


IMT Atlantique
Bretagne-Pays de la Loire
École Mines-Télécom

UEE - D

MÉCANIQUE QUANTIQUE: MOMENTS CINÉTIQUES EN MÉCANIQUE QUANTIQUE

CM2- MOMENT CINÉTIQUE DE SPIN ET COMPOSITION DE MOMENTS

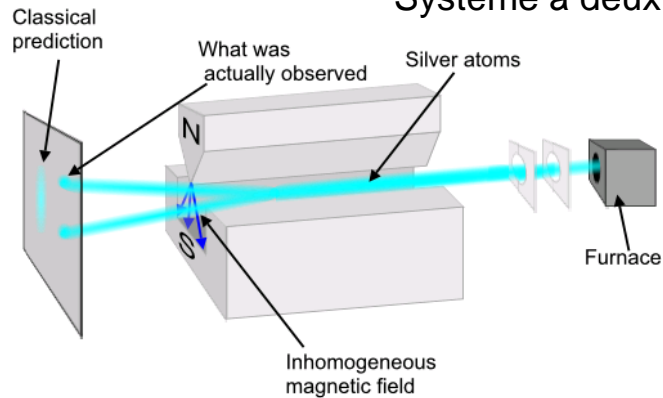


Vincent Vlamincq
Vincent.vlaminck@imt-atlantique.fr
Dpt. MO

NÉCESSITÉ D'UN MOMENT CINÉTIQUE SUPPLÉMENTAIRE

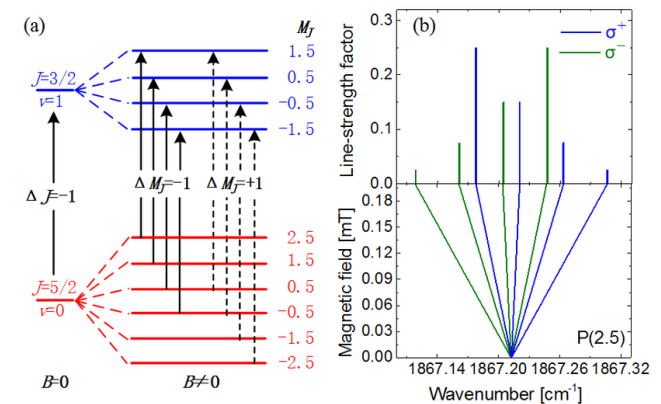
Expérience de Stern & Gerlach (1922)

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}



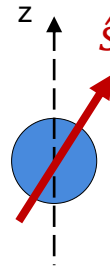
➡ incompatible avec un nombre impair d'états issus du moment cinétique orbital

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

$$\vec{\mu}_s = -g_s \frac{e}{2m} \vec{S}$$



- 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 $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ dont les composantes vérifient les mêmes 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{S}^2 et \hat{S}_z commutent, et ont une base propre commune $|s, m_s\rangle$ dans laquelle:

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

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

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

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

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) $[\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] = 2i \varepsilon_{jkl} \hat{\sigma}_l$

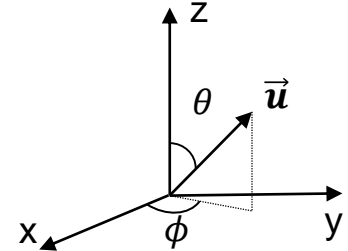
Rq: Comme \hat{S} ne dépend pas des coordonnées d'espace, il commute avec les opérateurs \hat{r} , \hat{p} , \hat{L} , et la fonction d'onde totale et le produit d'un terme spatial et un terme de spin

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

PRÉPARATION D'UN ÉTAT DE SPIN et MESURE DE SPIN

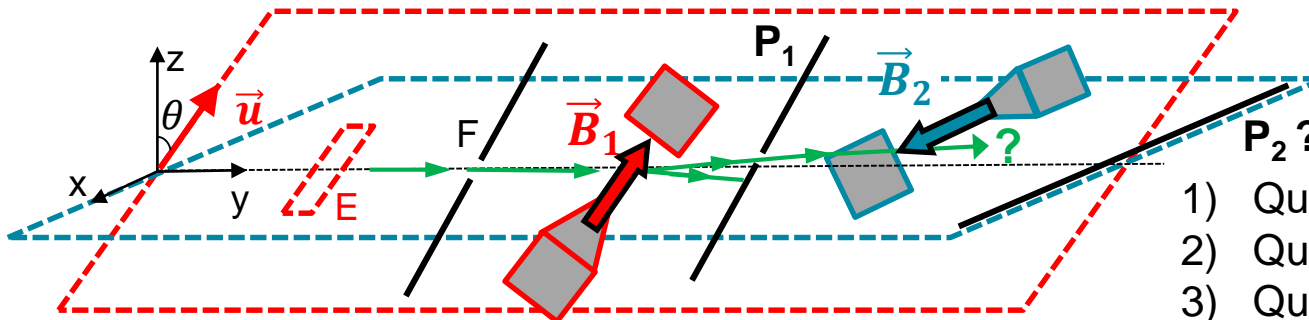
On suppose qu'un état de spin est arbitrairement préparé dans la direction $\vec{u} = \sin \theta \cos \phi \vec{u}_x + \sin \theta \sin \phi \vec{u}_y + \cos \theta \vec{u}_z$.
L'opérateur \hat{S}_u associé à cet état de spin s'écrit dans la base propre de \hat{S}_z $\{|+\rangle, |-\rangle\}$:

$$\hat{S}_u = \hat{S} \cdot \vec{u} = \sin \theta \cos \phi \hat{S}_x + \sin \theta \sin \phi \hat{S}_y + \cos \theta \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$



Les états propres de \hat{S}_u s'écrivent: $|+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} |-\rangle$
 $|-\rangle_u = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} |-\rangle$

Mesure de spin: $\vec{B}_1 \parallel \vec{u}$ ($\vec{u} \in (xOz)$) \rightarrow un seul état de spin $|+\rangle_u$ conservé après P1 $\rightarrow \vec{B}_2 \parallel \vec{u}_x$
 (Stern et Gerlach)

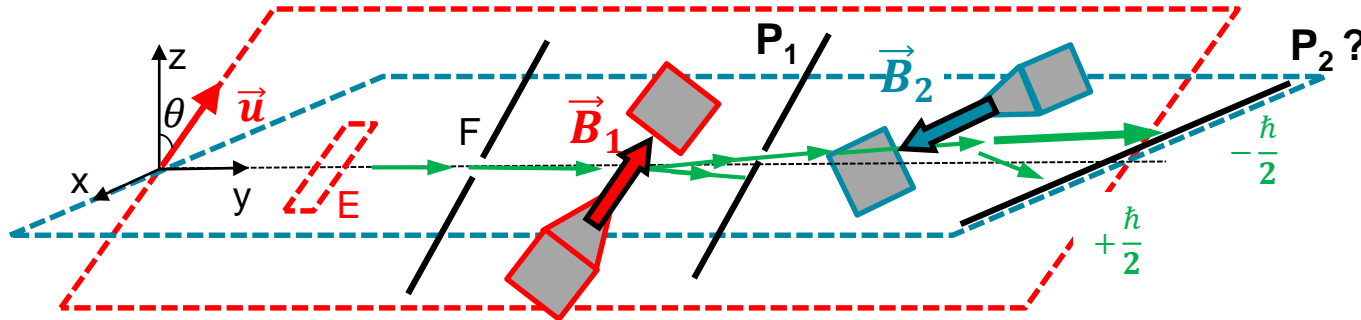


- 1) Qu'est qu'on observe sur l'écran P₂?
- 2) Quel est le résultat de la mesure de S_x ?
- 3) Quelles sont les probabilités associées aux différentes mesures de S_x ?
- 4) Quel est la valeur moyenne de $\langle S_x \rangle$?

MESURE DE SPIN - EXP° STERN et GERLACH

Mesure de spin: $\vec{B}_1 \parallel \vec{u}$ ($\vec{u} \in (xOz)$, $\phi = \pi$) \rightarrow un seul état de spin $|+\rangle_u$ conservé après P1 $\rightarrow \vec{B}_2 \parallel \vec{u}_x$

1) Qu'est qu'on observe sur l'écran P₂? \rightarrow deux taches d'intensité différente



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

$$\rightarrow S_x = \pm \frac{\hbar}{2}$$

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 P₁, les particules sont dans l'état $|+\rangle_u = -i \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + i \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle$.

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

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

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

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

PRÉCESSION LARMOR (i)

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

$$\vec{\mu}_S = \gamma \vec{S} \quad (\gamma = \text{rapport gyromagnétique})$$

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

On considère une particule de spin $1/2$ au repos dans un état de spin quelconque

$|\psi(0)\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} |-\rangle$ en présence d'un champ magnétique $\vec{B} = B_0 \vec{u}_z$ à $t=0$.

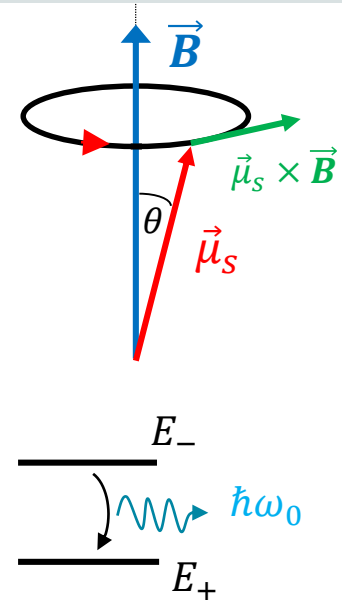
L'Hamiltonien lié à la particule s'écrit: $\hat{H} = -\gamma B_0 \hat{S}_z = -\gamma B_0 \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

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: $i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi(t)\rangle$.

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

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi + \omega_0 t}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi + \omega_0 t}{2}} |-\rangle$$

$$\begin{cases} \theta(t) = \theta_0 = Cte \\ \phi(t) = \phi_0 + \omega_0 t \end{cases}$$



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

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

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 ?

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

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

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

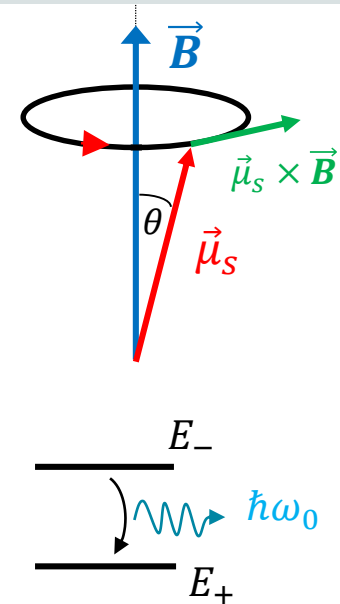
Independent du temps \hat{H} et \hat{S}_z commutent. \hat{S}_z est une constante du mouvement

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

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

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

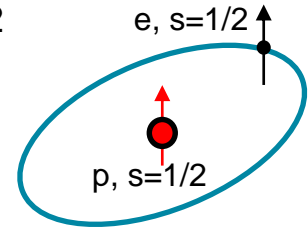


COMPOSITION DE MOMENT CINÉTIQUE – ATOME D'Hydrogène

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 :

$$\hat{S}_z \chi_e \chi_p = \hat{S}_z^e \chi_e \chi_p + \chi_e \hat{S}_z^p \chi_p = \hbar(\mathbf{m}_e + \mathbf{m}_s) \chi_e \chi_p \Rightarrow \begin{matrix} \uparrow\uparrow & \uparrow\downarrow & \downarrow\uparrow & \downarrow\downarrow \\ ep & ep & ep & ep \\ m = 1 & m = 0 & m = 0 & m = -1 \end{matrix}$$



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

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

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

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

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

$$j = \{(j_1 + j_2); (j_1 + j_2 - 1); \dots; |j_1 - j_2|\}$$

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

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

Les $C_{m_1, m_2}^{j_1 j_2}$ sont données par les coefficients de Clebsch-Gordon

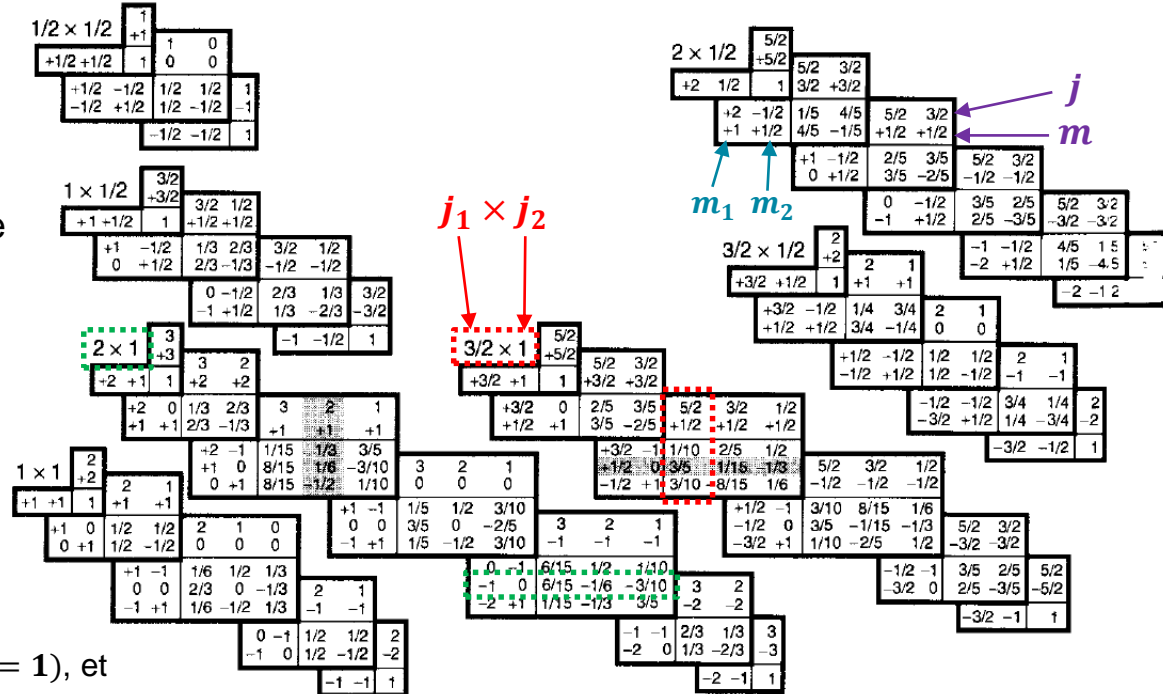
Exemple 1:

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

$$|\frac{5}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle |1, -1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle |1, 0\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}} |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle |1, 1\rangle$$

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

Coefficients de Clebsch-Gordon



Exemple 2:

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

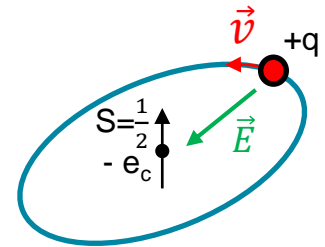
$$|2, -1\rangle |1, 0\rangle = \sqrt{\frac{6}{15}} |3, -1\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}} |2, -1\rangle - \sqrt{\frac{3}{10}} |1, -1\rangle$$

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

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

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

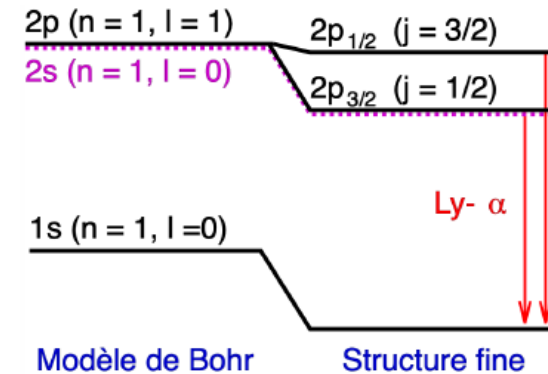
$$\langle \hat{H}_{SO} \rangle \propto \frac{\lambda}{2} J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)$$

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 $\{|L+S|; \dots; |L-S|\}$ 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: Dédoublage de la raie d'émission jaune du Sodium (Na) en deux raies respectivement à 589,0 nm et 589,6 nm.



TD2: $j_1 = j_2 = 1$

(3) Ecrire les états $|2,1\rangle$ et $|2,0\rangle$

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

Coefficients de Clebsch-Gordon

$$|2,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1\rangle|1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle|1,1\rangle$$

(2) $j=2$

$j_1 \times j_2$

