

MÉCANIQUE QUANTIQUE

Pr. Taoufik **OUALI**



SMP S5 2018/2019

f s o . u m p o u j d a . c o m

Table des matières

1	Rappel : Postulats de la Mécanique Quantique	3
1.1	Introduction	3
1.2	Enoncé des postulats	5
1.2.1	Notion d'état d'un système :	5
1.2.2	Description de grandeur physique :	5
1.2.3	Résultats possibles de la mesure d'une grandeur physique :	5
1.2.4	Réduction du paquet d'ondes :	9
1.2.5	Evolution des systèmes dans le temps :	10
1.2.6	Règles de quantification :	10
1.3	Interprétation physique des postulats :	11
1.3.1	Mécanisme de mesure et quantification :	11
1.3.2	Valeur moyenne et écart quadratique moyen d'une observable . . .	11
1.3.3	Compatibilité des observables	13
1.3.4	L'évolution dans le temps du système physique	16
1.3.5	Problèmes de potentiel de dimension 1 :	20
2	L'oscillateur harmonique à une dimension	23
2.1	Importance de l'oscillateur harmonique en physique :	23
2.2	l'oscillateur harmonique en mécanique classique :	24
2.3	Propriétés générales de l'hamiltonien quantique :	24
2.4	Etude de l'équation aux valeurs propres :	25
2.4.1	Les opérateurs $\hat{X}$ et $\hat{P}$:	25
2.4.2	Les opérateurs a , $a^\dagger$ et N	25
2.4.3	Spectres de N	26
2.4.4	Les états propres de H :	28
3	Le moment cinétique orbital	31
3.1	Introduction	31
3.2	Moments cinétiques et rotations	32
3.3	Invariance par rotation et moment cinétique	32
3.4	Commutation des moments cinétiques	34
3.5	L'observable L^2	34
3.6	Moment cinétique intrinsèque ou Spin $\vec{S}$	35

3.7	Moment cinétique général $\vec{J}$	35
3.7.1	Etats et valeurs propres communs de $\{J^2, J_z\}$	35
3.7.2	Les opérateurs $\{J_+, J_-\}$	36
3.7.3	Quantification	36
3.8	Application au moment cinétique orbital	39
3.8.1	Coordonnées sphériques	40
3.8.2	Opérateurs en coordonnées sphériques	40
3.8.3	Fonctions propres	41
3.8.4	Détermination de la fonction $F_{l,m}(\theta)$	42
4	Particules de spin $\frac{1}{2}$	47
4.1	Introduction	47
4.2	Expérience de Stern-Gerlach	47
4.2.1	Expérience :	48
4.2.2	Prévision classique :	48
4.3	Description mathématique de spin $\frac{1}{2}$:	49
4.3.1	L'espace des états du spin et observable S_z :	49
4.3.2	Observables S_x et S_y :	50
4.4	Illustration des postulats :	51
4.4.1	Préparation des états et mesure de spin :	51
4.4.2	Evolution d'un spin 1/2 dans un champ magnétique uniforme :	54
5	Produit tensoriel	57
5.1	Définition et Propriétés	57
5.2	Définition et Propriétés	58
5.3	système de deux spins 1/2	61
6	Composition de moments cinétiques	63
6.1	Problématique	63
6.2	Composition de deux spins 1/2	64
6.2.1	Rappels et notations	65
6.2.2	Valeurs et vecteurs propres de S_1^2, S_2^2, J^2 et J_z	66
6.3	Cas général : Composition de deux moments angulaires $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$	68
6.3.1	Les deux bases standards possibles	69
6.3.2	Passage d'une base à l'autre	70

Chapitre 1

Rappel : Postulats de la Mécanique Quantique

1.1 Introduction

En général, le mouvement d'un système matériel en mécanique classique est décrit par les variables q_i ($i = 1, \dots, N$) (dites coordonnées généralisées) et $\dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt}$ (vitesses généralisées). La donnée de ces variables, à chaque instant, permet de calculer la position et la vitesse d'un point quelconque du système. On définit le moment conjugué par :

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}$$

où $\mathcal{L} \equiv \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i, t)$ est appelé lagrangien du système. Les (q_i, p_i) sont appelés **variables dynamiques fondamentales**. A partir de ces variables, on peut exprimer toutes les **grandeurs physiques** associées au système (énergie, moment cinétique,...) comme **fonctions de ces derniers**. Ainsi la description d'un système se résume dans les points suivant :

1. L'état du système à un instant t_0 fixé est défini par la donnée des variables dynamiques (q_i, p_i) $i = 1, \dots, N$.
2. Une fois l'état du système est donné à un instant fixe, alors toutes les grandeurs physiques associées **sont parfaitement déterminées à cet instant**. (*Le résultat de toute mesure est donc prédit avec certitude*).

3. L'évolution dans le temps de l'état du système est donnée par les équations suivantes :

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \qquad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i},$$

dites équations canoniques de Hamilton-Jacobi. $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}(q_i, p_i, t)$ est la fonction d'Hamilton qui donne l'énergie totale du système. Ces équations différentielles sont de premier ordre ce qui implique que la solution (q_i, p_i) est unique si $(q_i(t_0), p_i(t_0))$ est fixé à un instant t_0 donné. (*Si on connaît l'état initial du système, alors son état à un instant quelconque est déterminé avec certitude*)

Cas particulier :

pour un point matériel en mécanique de Newton :

- $(q_i) \equiv \vec{r}$ (position), $(\dot{q}_i) \equiv \vec{v}$ (vitesse), $(p_i) \equiv \vec{p} = m\vec{v}$ et l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t),$$

(si les forces agissant sur le point dérivent d'un potentiel scalaire $V(\vec{r}, t)$).

- Les équations de Hamilton-Jacobi se réduisent à :

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{d\vec{p}}{m}, \qquad \frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla} V.$$

Dans le cas des systèmes quantiques, on a ainsi besoin de répondre aux questions suivantes :

1. Quelle description mathématique doit-on donner à un tel système à un instant donné ?
2. Une fois cet état donné, comment prévoir les résultats de mesures des diverses grandeurs physiques ?
3. Connaissant l'état du système à un instant t_0 , comment déterminer son état à un instant quelconque t ?

L'objet de ce chapitre est de répondre à ces questions en étudiant l'ensemble des postulats sur lesquels repose la mécanique quantique.

1.2 Enoncé des postulats

1.2.1 Notion d'état d'un système :

Dans le chapitre précédent on a associé un ket de l'espace des états d'une particule $\mathcal{E}$ à chaque fonction d'onde de l'espace des fonctions de carré sommable $\mathcal{F}$:

$$|\psi\rangle \in \mathcal{E} \longrightarrow \psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle \in \mathcal{F}$$

Cette fonction d'onde représente toute l'information possible sur l'état du système concerné. Cette notion d'état se généralise à un système physique quelconque :

Postulat1 : La connaissance du système à un instant donné est complètement contenue dans un ket $|\psi\rangle$ appartenant à l'espace des états $\mathcal{E}$.

1.2.2 Description de grandeur physique :

On a vu au Chap^{II}, qu'aux variables $\vec{r}$ et $\vec{p}$ sont associés respectivement les opérateurs $\vec{R}$ et $\vec{P}$ qui sont des observables. Cette affirmation est généralisée en postulat :

Postulat2 : Toute grandeur physique mesurable, qu'on note par $\mathcal{A}$, est représentée par une observable, A , agissant dans l'espace des états du système $\mathcal{E}$.

Remarque : En comparaison avec la mécanique classique, l'état et les grandeurs physiques sont représentés de façon différentes :

	Etat	Grandeurs physiques
Mécanique classique	Variables dynamiques	Fonctions des variables
Mécanique quantique	vecteur ket	Opérateurs observables

1.2.3 Résultats possibles de la mesure d'une grandeur physique :

Les valeurs propres d'une observable jouent un rôle primordial, elles sont au centre du troisième postulat :

Postulat3 : La mesure d'une grandeur physique $\mathcal{A}$ représentée par l'observable A ne peut fournir comme résultats que l'une des valeurs propres de l'opérateur A .

Remarque : Rappelons que les valeurs propres de A sont réelles. Si le spectre de A est discret, alors les grandeurs physiques sont **quantifiées**.

On vient de voir que les valeurs possibles d'une mesure appartiennent à un certain ensemble **prédéterminé** (le spectre de A). Il faut donc, pour la cohérence de la théorie, énoncer une règle qui permet la **prédiction effective** des résultats d'une mesure. Cette règle concerne la **probabilité** d'observer une parmi les valeurs possibles lors de la mesure d'une observable, elle est énoncée sous forme du postulat (appelé principe de décomposition spectrale)

a- Cas d'un spectre non dégénéré (discret) :

Soit $A |u_n\rangle = a_n |u_n\rangle$, a_i non dégénéré et $\{|u_i\rangle\}$ base orthonormée de $\mathcal{E}$. Soit le système dans l'état : $|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$

Postulat4 : La mesure de la grandeur physique représentée par l'observable A effectuée sur un état quelconque $|\psi\rangle$ (normalisé : $\langle\psi|\psi\rangle = 1$) donne le résultat a_n avec la probabilité :

$$\mathcal{P}(a_n) = |c_n|^2 = |\langle u_n|\psi\rangle|^2 \quad (1.1)$$

b- Cas d'un spectre dégénéré (discret) :

Dans ce cas on a $A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle$ et l'état du système se décompose sur la base des états propres de A comme suit :

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle \quad (1.2)$$

Postulat4 (étendu) : La mesure de la grandeur physique représentée par l'observable A effectuée sur un état quelconque normalisé $|\psi\rangle$ donne le

résultat a_n avec la probabilité :

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2 \quad (1.3)$$

- L'affirmation (1.3) contient (1.1), pour le voir il suffit de prendre $g_n = 1$ dans (1.3).
- Pour que cette généralisation ait un sens physique, il faut que la probabilité $\mathcal{P}(a_n)$ ne dépende pas de la base choisie dans $\mathcal{E}_n$. Pour le voir, prenons

$$|\psi_n\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle, \quad c_n^i = \langle u_n^i | \psi \rangle,$$

d'où :

$$|\psi_n\rangle = P_n |\psi\rangle;$$

où P_n est l'opérateur de projection sur $\{|u_n^i\rangle\}$

$$\implies \langle \psi_n | \psi_n \rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 = \mathcal{P}(a_n). \quad (1.4)$$

Sous cette forme (1.4) il est clair que $\mathcal{P}(a_n)$ n'est pas affectée par un changement de base dans $\mathcal{E}_n$ (de fait que la norme d'un ket ne dépend pas du choix de base). On peut encore développer cette expression (1.4) pour écrire la probabilité sous forme :

$$\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi | P_n^\dagger P_n | \psi \rangle = \langle \psi | P_n | \psi \rangle, \quad (1.5)$$

où on a utilisé les propriétés d'un projecteur, à savoir $P_n^\dagger = P_n$, et $P_n^2 = P_n$.

c- Cas d'un spectre continu (non dégénéré) :

On va se limiter ici au cas non dégénéré. On note les valeurs propres et états propres d'une observable A comme suit : $A|u_\alpha\rangle = \alpha|u_\alpha\rangle$, la décomposition de l'état du système sur cette base des états propres de A est donnée par :

$$|\psi\rangle = \int d\alpha c(\alpha) |u_\alpha\rangle \quad (1.6)$$

Postulat4 (cas continu) : *La probabilité élémentaire d'obtenir comme résultat de mesure la valeur propre située entre α et $\alpha + d\alpha$ est :*

$$d\mathcal{P}(\alpha) = |c(\alpha)|^2 d\alpha. \quad (1.7)$$

Si $\alpha \equiv$ position x , alors $c(\alpha) \equiv \psi(x)$ et $d\mathcal{P}(x)$ est la densité de probabilité d'observer la particule dans l'intervalle $[x, x + dx]$

Remarques :

1. Dans tous les énoncés précédents du postulat4 on a pris l'état du système normé ($\langle \psi | \psi \rangle = 1$), ce fait est essentiel pour avoir :

$$\sum_n \mathcal{P}(a_n) = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1.$$

Si ce n'est pas le cas, il suffit de modifier les définitions des probabilités comme suit :

→ Dans le cas discret :

$$\mathcal{P}(a_n) = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2.$$

→ Dans le cas continu :

$$d\mathcal{P}(\alpha) = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} |c(\alpha)|^2 d\alpha.$$

2. Si on remplace $|\psi\rangle$ par $|\psi'\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle$, $\theta \in \mathbf{R}$ on a

$$\langle \psi' | \psi' \rangle = \langle \psi | \psi \rangle, \quad |\langle u_n^i | \psi' \rangle|^2 = |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2,$$

ce qui donne :

$$\mathcal{P}(a_n)(\text{à partir de } |\psi'\rangle) = \mathcal{P}(a_n)(\text{à partir de } |\psi\rangle).$$

Cela signifie que deux vecteurs d'états égaux à une phase globale près représentent le même état physique.

Attention ! $|\phi\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$ et $|\phi'\rangle = \lambda_1 e^{i\theta_1}|\psi_1\rangle + \lambda_2 e^{i\theta_2}|\psi_2\rangle$ ne décrivent pas le même état ! (sauf si $\theta_2 = \theta_1 + 2n\pi$)

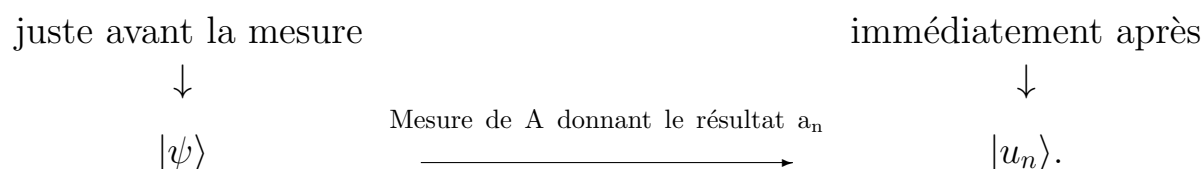
1.2.4 Réduction du paquet d'ondes :

C'est un phénomène spécifique de la mécanique quantique.

a- Cas non dégénéré :

Si une mesure est effectuée sur un état $|\psi\rangle$ et donne la valeur a_n à l'instant t , alors une mesure à l'instant immédiatement postérieur $t + dt$ ne peut donner que a_n et avec certitude. D'où le postulat :

Postulat5 : *Si la mesure $\mathcal{A}$ de l'observable A donne le résultat a_n et si la valeur propre a_n est non dégénérée, alors immédiatement après cette mesure, le système est dans l'état propre $|u_n\rangle$:*

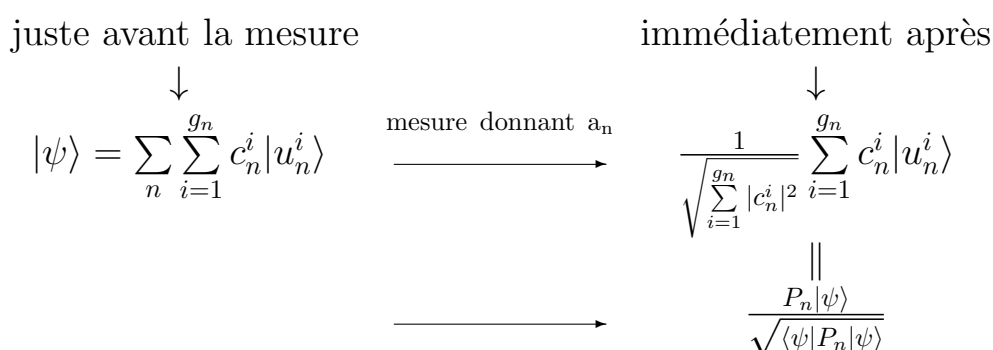


Cette évolution est une sorte de projection et pas une évolution dans le temps.

b- Cas dégénéré

Dans ce cas on a le postulat étendu suivant :

Postulat5 (étendu) : *Si la mesure $\mathcal{A}$ de l'observable A donne le résultat a_n et si la valeur propre a_n est dégénérée, alors l'état du système immédiatement après cette mesure est la projection du vecteur d'état juste avant la mesure sur le sous espace propre $\mathcal{E}_{g_n}$ associé à la valeur propre a_n :*



Ce postulat nous permet de noter aussi que l'opération de mesure permet de **préparer** un système dans un état bien particulier.

1.2.5 Evolution des systèmes dans le temps :

A un instant t donné, le système est dans l'état $|\psi(t)\rangle$, l'évolution au cours du temps de cet état est déterminée par une équation dite de Schrodinger. Cette équation ne se démontre pas et a le statut d'un postulat :

Postulat6 : *L'évolution d'un système, représenté par l'état $|\psi(t)\rangle$, dans le temps est gouvernée par l'équation :*

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle, \quad (1.8)$$

où $H(t)$ est l'observable associée à l'énergie du système, appelée l'hamiltonien du système.

1.2.6 Règles de quantification :

Etant donnée une grandeur physique classique, quel est son analogue en mécanique quantique ?

Considérons par exemple un système constitué d'une particule (sans spin), on a vu qu'on a la correspondance suivante :

$$\begin{array}{ccc} \vec{r} \text{ (vecteur position)} & \longrightarrow & \vec{R} \text{ (observable position)} \\ \vec{p} \text{ (vecteur impulsion)} & \longrightarrow & \vec{P} \text{ (observable impulsion)}. \end{array}$$

• **Règle générale :** L'observable A qui décrit une grandeur physique $\mathcal{A}$ définie classiquement, s'obtient en remplaçant, dans l'expression convenablement symétrisée de $\mathcal{A}$, $\vec{r}$ et $\vec{p}$ respectivement par les observables $\vec{R}$ et $\vec{P}$.

• **Exemple :**

$$\begin{array}{ccccc} \text{grandeur classique} & & \text{symétrisation} & & \text{observable correspondante} \\ \vec{r} \cdot \vec{p} & \longrightarrow & \frac{1}{2}(\vec{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{r}) & \longrightarrow & \frac{1}{2}(\vec{R} \cdot \vec{P} + \vec{P} \cdot \vec{R}) \end{array}$$

• Il existe des grandeurs physiques qui n'ont pas d'équivalent classique.

1.3 Interprétation physique des postulats :

1.3.1 Mécanisme de mesure et quantification :

- Lors d'une opération de mesure (Postulats 4 et 5) le système est perturbé de façon fondamentale. L'origine de cette perturbation est dû au fait que l'appareil de mesure interagit avec le système ce qui implique que la formulation indéterministe des postulats 4 et 5 est liée à cette interaction, et donc l'opération de mesure n'est pas définie en soi, mais par ses conséquences (juste après la mesure, le système est dans l'état propre etc.)
- Le postulat 3 permet d'expliquer la quantification de certaines grandeurs physiques, par exemple l'énergie des atomes,...Mais n'implique pas que toutes les grandeurs sont quantifiées, par exemple X et P ont des spectres continus.
- Dans les cas de la mesure de la position et d'impulsion d'un système dans l'état $|\psi\rangle$ (on prend dimension 1 pour simplifier), on obtient des résultats avec les probabilités suivantes :

$$d\mathcal{P}(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 dx = |\psi(x)|^2 dx,$$

résultat compris entre x et $x + dx$.

$$d\mathcal{P}(p) = |\langle p|\psi\rangle|^2 dp = |\bar{\psi}(p)|^2 dp,$$

résultat compris entre p et $p + dp$.

D'où la cohérence entre les règles de quantification et l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde.

1.3.2 Valeur moyenne et écart quadratique moyen d'une observable

a- Valeur moyenne :

Soit un état quelconque $|\psi\rangle$ (normé), préparable un nombre "infini" de fois. Soit A une observable dont le spectre est discret.

Supposons que sur N mesures de A on obtient $\mathcal{N}(a_n)$ fois la valeur propre a_n avec :

$$- \frac{\mathcal{N}(a_n)}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \mathcal{P}(a_n) : \text{probabilité de trouver } a_n.$$

$$-\sum_n \mathcal{N}(a_n) = N.$$

La valeur moyenne de l'observable A dans l'état normé $|\psi\rangle$, notée $\langle A \rangle$, est la moyenne des résultats obtenus en effectuant un grand nombre de mesure de A sur des systèmes tous dans l'état $|\psi\rangle$ (théoriquement on prend $N \rightarrow \infty$) :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_n a_n \frac{\mathcal{N}(a_n)}{N} \\ &= \sum_n a_n \mathcal{P}(a_n) \end{aligned} \quad (1.9)$$

on montre aussi que

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (1.10)$$

Remarque : Si $|\psi\rangle$ n'est pas normé, alors on modifie l'expression de la valeur moyenne (1.10) en divisant par la norme de $|\psi\rangle$:

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

b- Ecart quadratique moyen :

La valeur moyenne ne donne aucune idée sur la dispersion des résultats que l'on peut s'attendre à obtenir dans une mesure de A . Pour rendre compte de cette dispersion, on définit l'écart quadratique moyen, noté ΔA , par

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle, \quad (1.11)$$

et on montre facilement que :

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}. \quad (1.12)$$

Dans le cas d'un spectre continu ($A|v_\alpha\rangle = \alpha|v_\alpha\rangle$), on a :

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \int (\alpha - \langle A \rangle)^2 |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha \\ &= \int \alpha^2 |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha - [\int \alpha |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha]^2 \end{aligned} \quad (1.13)$$

c- Relations d'incertitude de Heisenberg

Soient les observables position X et impulsion P satisfaisant les relations de commutation données en (??), et soit $|\varphi\rangle = (X + i\lambda P)|\psi\rangle$, avec $|\psi\rangle$ normé

et où le paramètre $\lambda \in \mathbf{R}$. On a $\langle \varphi | \varphi \rangle \geq 0$, or :

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \varphi \rangle &= \langle \psi | (X - i\lambda P)(X + i\lambda P) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | X^2 | \psi \rangle + i\lambda \langle \psi | (XP - PX) | \psi \rangle + \lambda^2 \langle \psi | P^2 | \psi \rangle \\ &= \langle X^2 \rangle - \lambda \hbar \langle \psi | \psi \rangle + \lambda^2 \langle P^2 \rangle \\ &= \langle X^2 \rangle - \lambda \hbar + \lambda^2 \langle P^2 \rangle, \end{aligned}$$

on obtient ainsi un polynôme de degré 2 en λ , d'où :

$$\langle \varphi | \varphi \rangle \geq 0 \quad \text{ssi} \quad \Delta = \hbar^2 - 4\langle X^2 \rangle \langle P^2 \rangle \leq 0,$$

c'est à dire $\langle X^2 \rangle \langle P^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$.

Posons $X' = X - \langle X \rangle$, $P' = P - \langle P \rangle$, alors $[X', P'] = i\hbar$ et $\langle X'^2 \rangle \langle P'^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$. Or $\langle X'^2 \rangle = (\Delta X)^2$ et $\langle P'^2 \rangle = (\Delta P)^2$ ce qui donne finalement :

$$\Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (1.14)$$

Le même raisonnement pour Y , P_y , Z et P_z (si on est en 3 dimensions) donne des relations analogues à (1.14).

Remarques :

- $\Delta X \Delta P = \frac{\hbar}{2}$ (valeur minimal) n'est vrai que si $\psi(x)$ est un paquet d'onde gaussien.
- En général on montre que, pour deux observables A et B : $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$

1.3.3 Compatibilité des observables

Deux observables A et B sont compatibles si les grandeurs physiques qu'elles représentent peuvent être simultanément parfaitement déterminées. L'ordre dans lequel on effectue les mesures n'a pas d'importance. On a dans ce cas $[A, B] = 0$; et donc (voir chapitre II) il existe une base d'états propres communs, qu'on note $\{|a_n, b_n, i\rangle\}$ (l'indice (i) indique que $\{A, B\}$ peut ne pas être un E.C.O.C.) :

$$\begin{aligned} A|a_n, b_p, i\rangle &= a_n|a_n, b_p, i\rangle \\ B|a_n, b_p, i\rangle &= b_p|a_n, b_p, i\rangle \end{aligned}$$

a- Probabilités :

Soit l'état du système donné par $|\psi\rangle = \sum_{n,p,i} c_{n,p,i} |a_n, b_p, i\rangle$; calculons la probabilité $\mathcal{P}(a_n, b_p)$ d'obtenir lors de la première mesure a_n et lors de la deuxième b_p

1^{ère} mesure :

- la probabilité de trouver a_n est donnée par :

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{p,i} |c_{n,p,i}|^2$$

- L'état immédiatement après cette mesure est donné par :

$$|\psi'_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{p,i} |c_{n,p,i}|^2}} \sum_{p,i} c_{n,p,i} |a_n, b_p, i\rangle$$

2^{ème} mesure :

L'état du système est maintenant $|\psi'_n\rangle$:

- La probabilité de trouver b_p est donnée par :

$$\mathcal{P}_{a_n}(b_p) = \frac{1}{\sum_{p,i} |c_{n,p,i}|^2} \sum_i |c_{n,p,i}|^2$$

- L'état immédiatement après cette deuxième mesure est donné par :

$$|\psi''_{n,p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_i |c_{n,p,i}|^2}} \sum_i c_{n,p,i} |a_n, b_p, i\rangle. \quad (1.15)$$

La probabilité de trouver a_n lors de la première mesure et b_p lors de la deuxième est :

$$\mathcal{P}(a_n, b_p) = \mathcal{P}(a_n) \cdot \mathcal{P}_{a_n}(b_p) = \sum_i |c_{n,p,i}|^2 \quad (1.16)$$

$|\psi''_{n,p}\rangle$ donné par (1.15) est un état propre commun à A et B , donc si on mesure à nouveau A et B on trouve à coup sûr (a_n, b_p) .

Si on inverse l'ordre de mesure (la première mesure porte sur B puis la deuxième sur A), alors on aura :

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(b_p, a_n) &= \sum_i |c_{n,p,i}|^2 \\ |\varphi''_{p,n}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\sum_i |c_{n,p,i}|^2}} \sum_i c_{n,p,i} |a_n, b_p, i\rangle.\end{aligned}$$

On conclut ainsi que lorsqu'on mesure deux observables **compatibles**, les **prédictions** physiques sont **les mêmes, quelque soit l'ordre** dans lequel on effectue les mesures :

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(a_n, b_p) &= \mathcal{P}(b_p, a_n) = \sum_i |\langle a_n, b_p, i | \psi \rangle|^2 \\ |\psi''_{n,p}\rangle &= |\varphi''_{p,n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_i |c_{n,p,i}|^2}} \sum_i c_{n,p,i} |a_n, b_p, i\rangle\end{aligned}$$

Dans le cas où $[A, B] \neq 0$ A et B sont dits incompatibles. Si on mesure A puis B on aura :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{1}^{\text{ere}} \text{ mesure donne } a_1} |u_1\rangle \xrightarrow{\text{2}^{\text{eme}} \text{ mesure donne } b_2} |v_2\rangle$$

Si on mesure B d'abord puis on effectue une mesure de A on aura :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{1}^{\text{ere}} \text{ mesure donne } b_2} |v_2\rangle \xrightarrow{\text{2}^{\text{eme}} \text{ mesure donne } a_1} |u_1\rangle.$$

L'état final dépend de l'ordre dans lequel on a effectué les deux mesures. Deux observables incompatibles ne peuvent pas être mesurées simultanément ; la seconde mesure fait perdre l'information fournie par la première.

b- Préparation d'état :

• Cas non dégénéré :

Soit A une observable dont le spectre $\{a_n\}$ est non dégénéré et soit l'état du système $|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle$ ($\{|u_n\rangle\}$ est la base des états propres de A). Si la mesure de A sur cet état donne la valeur propre a_n alors l'état du système immédiatement après la mesure est $\frac{c_n}{|c_n|} |u_n\rangle \equiv |u_n\rangle$. *L'état du système après la mesure est déterminé **sans ambiguïté**.*

• Cas dégénéré :

Dans ce cas le spectre de A est dégénéré : $A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle, i = 1, \dots, g_n$, l'état du système se décompose sur la base des états propres de A comme : $|\psi\rangle = \sum_{n,i} c_n^i |u_n^i\rangle$. Si la mesure de A sur cet état donne la valeur propre a_n alors l'état

du système immédiatement après la mesure est $|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_i |c_i|^2}} \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle$; les

c_n^i sont fixés par la donnée de l'état avant la mesure $|\psi\rangle$. Ainsi l'état $|\psi'\rangle$ après la mesure **dépend** donc de $|\psi\rangle$.

Introduisons une deuxième observable B tel que $[A, B] = 0$:

★ Si $\{A, B\}$ forme un *E.C.O.C*, alors il existe une base des états propres communs **unique** : $\{|a_n, b_p\rangle\}$.

Si la mesure de A et B sur l'état $|\psi\rangle = \sum_{n,p} c_{n,p} |a_n, b_p\rangle$ donne (a_n, b_p) alors

l'état du système immédiatement après la mesure est : $|\psi''_{n,p}\rangle = \frac{c_{n,p}}{|c_{n,p}|} |a_n, b_p\rangle \equiv |a_n, b_p\rangle$

La donnée du résultat de mesure **fixe de façon unique l'état final** du système; indépendamment de l'état initial.

★★ Si $\{A, B\}$ n'est pas un *E.C.O.C*, alors au couple (a_n, b_p) correspond les états propres communs $|a_n, b_p, i\rangle$, et l'état après la mesure ne sera pas déterminé de manière unique. On recommence ainsi le même raisonnement en introduisant une troisième observable C compatible avec A et B :

Pour que l'état du système après une mesure soit déterminée, dans tous les cas, uniquement par le résultat obtenu, il faut que cette mesure porte sur un E.C.O.C.

Ce qui justifie physiquement l'introduction de la notion d'*E.C.O.C*. La mesure d'un *E.C.O.C* permet de préparer le système dans un état quantique déterminé.

1.3.4 L'évolution dans le temps du système physique

D'après le 6^{ème} postulat, l'équation de Schrodinger (1.8) régit l'évolution du système physique dans le temps. Etudions les propriétés générales de cette équation :

a- Evolution de la valeur moyenne d'une observable :

Soit le système dans l'état $|\psi(t)\rangle$ à l'instant t , la valeur moyenne d'une observable A dans cet état est donnée par (1.10). Cette valeur moyenne peut dépendre du temps et on l'écrit :

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle.$$

En utilisant l'équation de Scrodinger (1.8) on montre que l'évolution de la moyenne de A est régit par l'équation suivante :

$$\frac{d}{dt}[\langle A \rangle(t)] = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H(t)] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle. \quad (1.17)$$

Notons que $\langle A \rangle$ ne dépend que de temps t .

Exemple :

Considérons une particule plongée dans un potentiel scalaire $V(\vec{r})$, l'hamiltonien de ce système s'écrit :

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R}). \quad (1.18)$$

A partir de (1.17) et en utilisant (??) et (1.18), on peut calculer les valeurs moyennes de $\vec{R}$ et $\vec{P}$, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{R}, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial \vec{R}}{\partial t} \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{R}, \frac{\vec{P}^2}{2m}] \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{P}, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{P}, V(\vec{R})] \rangle. \end{aligned}$$

On voit ici que $\vec{R}$ et $\vec{P}$ ne dépendent pas de temps contrairement au cas classique ($\vec{r}(t)$, $\vec{p}(t)$). *Toute la dépendance en t est reportée dans le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$.*

Finalement en utilisant le fait que $([A, F(B)] = [A, B] \frac{dF(B)}{dB}$ voir TD), on montre que :

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{P} \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle = -\langle \vec{\nabla} V(\vec{R}) \rangle. \quad (1.19)$$

Ce résultat est appelé **Théorème d'Ehrenfest**, à comparer avec les équations calssique de Newton (voir introduction de ce chapitre).

b- Systèmes Conservatifs :

Ce sont les systèmes dont l'hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps. En mécanique classique ceci a pour conséquence la conservation de l'énergie du système et l'énergie totale est dite dans ce cas **constante de mouvement**. En mécanique quantique on a :

• Equation aux valeurs propres :

l'équation aux valeurs propres pour H est

$$H|\varphi_{n,\tau}\rangle = E_n|\varphi_{n,\tau}\rangle, \quad (1.20)$$

où l'indice τ repère les valeurs propres d'opérateurs formant avec H un *E.C.O.C.*

Les valeurs et les états propres de H ne dépendent pas du temps t .

Ecrivons l'état du système comme :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t)|\varphi_{n,\tau}\rangle, \quad (1.21)$$

toute la dépendance temporelle de $|\psi(t)\rangle$ est contenue dans les composantes $c_{n,\tau}(t) = \langle\varphi_{n,\tau}|\psi(t)\rangle$. Donc connaissant l'état initial $|\psi(t_0)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t_0)|\varphi_{n,\tau}\rangle$,

on aura à partir de (1.8) :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t_0)e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|\varphi_{n,\tau}\rangle. \quad (1.22)$$

Remarque : Dans le cas du spectre continu de H on a :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\tau} \int dE c_{n,\tau}(E, t_0)e^{-iE(t-t_0)/\hbar}|\varphi_{n,\tau}\rangle.$$

•Etat stationnaires :

Si $|\psi(t_0)\rangle$ est lui même état propre de H de valeur propre E_n :

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{\tau} c_{n,\tau}(t_0)|\varphi_{n,\tau}\rangle,$$

alors

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\tau} c_{n,\tau}(t_0)e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|\varphi_{n,\tau}\rangle = e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|\psi(t_0)\rangle \equiv |\psi(t_0)\rangle.$$

Les propriétés physiques d'un système qui se trouve dans un état propre de H ne varient pas au cours du temps. Pour cette raison les états propres de H sont dits états stationnaires.

• Conservation de l'énergie en mécanique quantique :

Si à $t = t_0$ le système est dans l'état $|\psi(t_0)\rangle$, alors si la mesure de l'énergie donne une valeur E_k , l'état après cette mesure sera donc $|\varphi_{k,\tau}\rangle$. Si on répète la mesure une deuxième fois, on aura avec certitude E_k et l'état du système restera toujours $|\varphi_{k,\tau}\rangle$. Ainsi quelque soit le nombre de mesures qu'on effectuera après, on trouvera toujours la même énergie E_k et le même état $|\varphi_{k,\tau}\rangle$.

L'état du système n'évoluera plus après la première mesure. L'évolution physique dans le temps ne se produit que si l'énergie de l'état initial n'est pas bien définie (non connue avec certitude).

• Constantes de mouvement :

Ce sont les observables qui ne dépendent pas explicitement du temps et qui commutent avec l'hamiltonien H :

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0 \quad [A, H] = 0. \quad (1.23)$$

Les constantes de mouvement A possèdent les propriétés suivantes :

1. La valeur moyenne de A dans l'état $|\psi(t)\rangle$ n'évolue pas au cours du temps : $\frac{d}{dt}\langle A \rangle = 0$.
2. Puisque $[A, H] = 0$, alors il existe une base $\{|\varphi_{n,p,\tau}\rangle\}$ des états propres communs à A et H dans $\mathcal{E}$ (les indices n et p pour repérer respectivement les valeurs propres de H et A , l'indice τ pour indiquer que $\{A, H\}$ peut ne pas être un E.C.O.C) :

$$H|\varphi_{n,p,\tau}\rangle = E_n|\varphi_{n,p,\tau}\rangle, \quad A|\varphi_{n,p,\tau}\rangle = a_p|\varphi_{n,p,\tau}\rangle.$$

Donc si le système est dans un état stationnaire $|\varphi_{n,p,\tau}\rangle$, il y restera indéfiniment. Les valeurs propres de A sont dits dans ce cas des bons nombres quantiques.

3. Pour un état quelconque $|\psi(t)\rangle$, la probabilité de trouver la valeur propre a_p ne dépend pas du temps :
 $\rightarrow$ à $t = t_0$ $|\psi(t_0)\rangle = \sum_{n,p,\tau} c_{n,p,\tau}(t_0)|\varphi_{n,p,\tau}\rangle$, donc la probabilité de

trouver la valeur a_p est

$$\mathcal{P}(a_p, t_0) = \sum_{n,\tau} |c_{n,p,\tau}(t_0)|^2$$

→ à $t = t_1$ les composantes de $|\psi(t_1)\rangle$ seront d'après (1.21 et 1.22) :
 $c_{n,p,\tau}(t_1) = c_{n,p,\tau}(t_0)e^{-iE_n(t_1-t_0)/\hbar}$, ce qui implique :

$$\mathcal{P}(a_p, t_1) = \sum_{n,\tau} |c_{n,p,\tau}(t_1)|^2 = \sum_{n,\tau} |c_{n,p,\tau}(t_0)|^2 = \mathcal{P}(a_p, t_0).$$

Remarque : Pour un système conservatif, H est une constante de mouvement.

1.3.5 Problèmes de potentiel de dimension 1 :

Il s'agit d'étudier des système quantiques soumis à des potentiels $V(x)$ de formes simples : constants et ne variant que par discontinuité en un certains nombres de points. L'hamiltonien est donné par :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$$

L'équation de Schrödinger (1.8) s'écrit en représentation $\{|x\rangle\}$ comme :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t) = i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x, t) \quad (1.24)$$

Si $|\psi(0)\rangle$ est un état stationnaire ($H|\psi(0)\rangle = E|\psi(0)\rangle$), alors $|\psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\psi(0)\rangle$ et

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle = e^{-iEt/\hbar} \psi(x, 0) = e^{-iEt/\hbar} \varphi(x).$$

Dans ce cas (1.24) devient :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + (E - V(x)) \varphi(x) = 0 \quad (1.25)$$

Pour résoudre cette équation différentielle il faut comparer E et V dans chaque intervalle où $V(x) = V$ est constant :

1. Si $E > V$, on pose $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)$ et l'équation (1.25) devient :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k^2\varphi(x) = 0 \quad (1.26)$$

dont la solution est $\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ avec A et B des complexes.

2. Si $E < V$, on pose alors $\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)$ et $\varphi(x) = Ce^{\rho x} + De^{-\rho x}$ avec C et D des complexes.

3. Si $E = V$ alors $\varphi(x) = ax + b$, a et b des complexes.

Aux points de discontinuités (finie), les conditions de raccordements sont :

1. $\varphi(x)$ est continue.
2. $\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}$ est continue.

Pour voir la continuité de $\varphi'(x)$ intégrons l'équation de Schrödinger autour d'un point de discontinuité x_0 , c.à.d. sur l'intervalle $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$, $\epsilon \ll 1$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\varphi'(x_0 + \epsilon) - \varphi'(x_0 - \epsilon)) = \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} (E - V)\varphi(x)dx$$

Puisque V est fini alors $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} (E - V)\varphi(x)dx = 0$ d'où la continuité de $\varphi'(x)$. Par contre $\varphi''(x)$ est discontinue.

Remarque : Si la discontinuité est infinie $\varphi'(x)$ n'est plus continue.

Exemples de potentiels importants :

- Marches de potentiel, Barrière de potentiel, Puit de potentiel,...

Chapitre 2

L'oscillateur harmonique à une dimension

2.1 Importance de l'oscillateur harmonique en physique :

L'exemple le plus simple est celui d'une particule de masse m dans un potentiel $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. La force de rappel $F_x = -\frac{dV}{dx} = -kx$ attire la particule vers la position d'équilibre stable $x = 0$ (minimum de $V(x)$). Le mouvement de la particule est une oscillation sinusoïdale autour de $x = 0$ de pulsation $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

Le comportement d'un système au voisinage de la position d'équilibre stable est régi par les équations d'un oscillateur harmonique (du moins à la limite des petites oscillations). On cite les phénomènes de vibration des atomes d'une molécule, les oscillations des atomes ou ions d'un réseau cristallin (phonons)...

Le champ électromagnétique (e.m.), en le développant suivant les modes propres de la cavité où il existe, est formellement équivalent à un ensemble d'oscillateurs harmoniques. C'est l'étude de ces oscillateurs à l'équilibre thermique (corps noir) qui a conduit Planck à introduire la constante h qui porte son nom.

L'oscillateur harmonique joue également un rôle important dans la description d'un ensemble de particules identiques se trouvant toutes dans le même état quantique (bosons) distantes les unes des autres d'un niveau d'énergie égale à $\hbar\omega$.

2.2 l'oscillateur harmonique en mécanique classique :

Le mouvement de la particule est régi par l'équation fondamentale de la dynamique :

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 x}{dt^2} &= -\frac{dV}{dx} = -kx; & V(x) &= \frac{1}{2} kx^2 \\ \Leftrightarrow \ddot{x} + \frac{k}{m}x &= 0; & \omega^2 &= \frac{k}{m} \\ \Rightarrow x &= x_M \cos(\omega t - \varphi) \end{aligned}$$

x_M et φ sont des constantes qu'on détermine par les conditions initiales. C'est un mouvement oscillatoire sinusoïdale autour du point $x = 0$ d'amplitude x_M et de pulsation ω .

L'énergie totale $E = \frac{1}{2}m(\frac{dx}{dt})^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x_M^2$; qui est constante par rapport au temps.

En fixant E , l'énergie potentielle est maximum et l'énergie cinétique est nulle aux points $\pm x_M$ alors qu'en $x = 0$, $E_p = 0$ et E_c est maximale.

2.3 Propriétés générales de l'hamiltonien quantique :

Le principe de correspondance en Mécanique quantique permet facilement de déterminer l'opérateur hamiltonien qui correspond à l'énergie totale du système.

à la position x on associe l'observable X

à l'impulsion p on associe l'observable P

à l'énergie E on associe l'observable $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$

H étant indépendant du temps (système conservatif) donc l'étude quantique de l'oscillateur harmonique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres : $H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$. En représentation $\{|x\rangle\}$

$$\langle x|H|\varphi\rangle = \langle x|E|\varphi\rangle = E\varphi(x)$$

$$\langle x|\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2|\varphi\rangle = E\varphi(x); \quad P \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}; \quad X \equiv x \text{ en représentation } \{|x\rangle\}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\varphi(x) = E\varphi(x)$$

2.4 Etude de l'équation aux valeurs propres :

2.4.1 Les opérateurs $\hat{X}$ et $\hat{P}$:

Les observables telles que X et P et les quantités ω et $\hbar$ ont les dimensions suivantes $[X]$: longueur ; $[P]$: impulsion ; $[\omega]$: inverse du temps et $[\hbar]$: [action] : énergie fois le temps.

Par conséquent, pour plus de commodité, on introduit les observables sans dimension suivantes :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X \quad \text{et} \quad \hat{P} = \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}P \quad (2.1)$$

Ainsi $[X, P] = i\hbar$ devient $[\hat{X}, \hat{P}] = i$ et l'hamiltonien $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$ devient

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad (2.2)$$

avec $H = \hbar\omega\hat{H}$. Ainsi au lieu de chercher les solutions de l'équation aux valeurs propres $H|\varphi_\nu\rangle = E_\nu|\varphi_\nu\rangle$ on cherche ceux de $\hat{H}|\varphi_\nu\rangle = \varepsilon_\nu|\varphi_\nu\rangle$ avec $\varepsilon_\nu = \frac{E_\nu}{\hbar\omega}$.

Ainsi chercher les valeurs propres de H revient à chercher les valeurs propres de $\hat{H}$.

2.4.2 Les opérateurs a , $a^\dagger$ et N

Dans le cas où x et p sont des nombres et non des opérateurs on peut écrire $x^2 + p^2 = (x + ip)(x - ip)$. Et puisque $\hat{X}$ et $\hat{P}$ sont des opérateurs qui ne commutent pas on ne peut pas alors écrire $\hat{X}^2 + \hat{P}^2$ comme $(\hat{X} + i\hat{P})(\hat{X} - i\hat{P})$ mais toutefois on peut s'aider avec ces opérateurs en posant :

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) : \text{appelé opérateur d'annihilation} \\ a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) : \text{appelé opérateur de création} \end{aligned} \quad (2.3)$$

On peut montrer facilement que

$$\begin{aligned} \hat{X} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \\ \hat{P} &= \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \end{aligned} \quad (2.4)$$

$\hat{X}$ et $\hat{P}$ étant hermitique, ce qui n'est pas le cas pour a et $a^\dagger$ mais a est adjoint de $a^\dagger$. On peut vérifier facilement que $[a, a^\dagger] = 1$.

Soit maintenant l'opérateur hermitique, $N = a^\dagger a$, appelé opérateur nombre. On montre que d'après (2.2)

$$\begin{aligned}\hat{H} &= a^\dagger a + \frac{1}{2} = N + \frac{1}{2} \\ \hat{H} &= a a^\dagger - \frac{1}{2}\end{aligned}$$

Ainsi les vecteurs propres de $\hat{H}$ sont vecteurs propres de N et vice versa. L'étude de l'équation aux valeurs propres de H est remplacée par $N|\varphi_\nu\rangle = \nu|\varphi_\nu\rangle$. Calculons $[N, a]$

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger a a - a a^\dagger a = [a^\dagger, a] a = -a$$

donc $[N, a] = -a$ de même $[N, a^\dagger] = a^\dagger$

2.4.3 Spectres de N

1. Lemme1 : Propriétés des valeurs propres de N :

Les valeurs propres ν de N sont positives ou nulles.

En effet : Soit $|\varphi_\nu\rangle$ un vecteur propre de N avec la valeur propre ν : $N|\varphi_\nu\rangle = \nu|\varphi_\nu\rangle$ on a

$$\begin{aligned}\|a|\varphi_\nu\rangle\|^2 &= \langle\varphi_\nu|a^\dagger a|\varphi_\nu\rangle \geq 0 \\ &= \langle\varphi_\nu|N|\varphi_\nu\rangle \geq 0 \\ &= \nu\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle \geq 0\end{aligned}$$

comme $\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle > 0 \Rightarrow \nu \geq 0 \quad \square$

2. Lemme2 : Propriétés des vecteurs propres $a|\varphi_\nu\rangle$:

Soit $|\varphi_\nu\rangle$ un vecteur propre non nul de N , de valeur propre ν .

(a) si $\nu = 0$, alors le ket $a|\varphi_0\rangle = 0$

(b) si $\nu > 0$, alors le ket $a|\varphi_\nu\rangle$ est un vecteur propre non nul de N , de valeur propre $(\nu - 1)$

En effet :

(a) D'après le lemme1 on a $\| a|\varphi_\nu\rangle \|^2 = \nu \langle \varphi_\nu | \varphi_\nu \rangle = 0$ si $\nu = 0$; or la norme d'un vecteur est nulle ssi ce vecteur est nul : $a|\varphi_0\rangle = 0 \ \forall \ |\varphi_0\rangle$

(b) si $\nu > 0$ alors $a|\varphi_\nu\rangle \neq 0$ puisque le carré de sa norme est non nul.

Montrons maintenant que $a|\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N :

On sait que $[N, a]|\varphi_\nu\rangle = -a|\varphi_\nu\rangle$ c.à.d.

$$\begin{aligned} Na|\varphi_\nu\rangle &= aN|\varphi_\nu\rangle - a|\varphi_\nu\rangle \\ &= a\nu|\varphi_\nu\rangle - a|\varphi_\nu\rangle \\ N(a|\varphi_\nu\rangle) &= (\nu - 1)a|\varphi_\nu\rangle \end{aligned}$$

ce qui montre que $a|\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $(\nu - 1)$ $\square$

3. Lemme3 : Propriétés des vecteurs propres $a^\dagger|\varphi_\nu\rangle$:

Soit $|\varphi_\nu\rangle$ un vecteur propre non nul de N , de valeur propre ν .

(a) Le ket $a^\dagger|\varphi_\nu\rangle$ est toujours non nul.

(b) Le ket $a^\dagger|\varphi_\nu\rangle$ est un vecteur propre non nul de N , de valeur propre $(\nu + 1)$

En effet :

(a)

$$\begin{aligned} \| a^\dagger|\varphi_\nu\rangle \|^2 &= \langle \varphi_\nu | aa^\dagger|\varphi_\nu\rangle \\ &= \langle \varphi_\nu | (N + 1)|\varphi_\nu\rangle \\ &= (\nu + 1)\langle \varphi_\nu | \varphi_\nu\rangle \end{aligned}$$

$\langle \varphi_\nu | \varphi_\nu\rangle \neq 0$ donc $\nu + 1 > 0 \ \forall \ \nu \Rightarrow a^\dagger|\varphi_\nu\rangle$ est toujours non nul

(b) On sait que $[N, a^\dagger]|\varphi_\nu\rangle = a^\dagger|\varphi_\nu\rangle$

$$\begin{aligned} Na^\dagger|\varphi_\nu\rangle &= a^\dagger N|\varphi_\nu\rangle + a^\dagger|\varphi_\nu\rangle \\ &= a^\dagger\nu|\varphi_\nu\rangle + a^\dagger|\varphi_\nu\rangle \\ N(a^\dagger|\varphi_\nu\rangle) &= (\nu + 1)a^\dagger|\varphi_\nu\rangle \end{aligned}$$

ce qui montre que $a^\dagger|\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $(\nu + 1)$ $\square$

4. Théorème :

Le spectre des valeurs propres de N est constitué des nombres entiers non négatifs

En effet :

supposons ν non entière, c.à.d. qu'il existe un nombre $n \in \mathbf{N}$ tel que : $n < \nu < n + 1$ (*) et soit la suite de vecteurs $a|\varphi_\nu\rangle, a^2|\varphi_\nu\rangle, a^3|\varphi_\nu\rangle, \dots, a^n|\varphi_\nu\rangle$. D'après le lemme2, cette suite est vecteurs propres de N avec les valeurs propres (positives ou nulles d'après le lemme1) respectives : $(\nu - 1), (\nu - 2), (\nu - 3), \dots, (\nu - n) \geq 0$,

or d'après (*) on a $0 < \nu - n < 1$ c.à.d. $\nu - n - 1 < 0$ (**)

Considérons maintenant le vecteur $a(a^n|\varphi_\nu\rangle)$ qui est vecteur propre de N de valeur propre $\nu - n - 1$. Cette valeur propre est négative d'après (**), ce qui contredit le lemme1. Donc ν est nécessairement entière.

Si $\nu = n \in \mathbf{N}$ alors $a^n|\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $\nu - n = n - n = 0$ et d'après le lemme2 $a(a^n|\varphi_\nu\rangle) = 0$

Dans la suite on prendra $\nu = n$ et on écrira :

$a|\varphi_n\rangle, a^2|\varphi_n\rangle, a^3|\varphi_n\rangle, \dots, a^n|\varphi_n\rangle, 0, 0, 0, \dots$

On remarque que cette suite est limitée car on ne peut jamais avoir des vecteurs propres non nuls correspondant à des valeurs propres négatives.

5. Valeurs propres de H :

rappelons que $H = \hbar\omega\hat{H} = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})$

$$\begin{aligned} H|\varphi_n\rangle &= \hbar\omega(N + \frac{1}{2})|\varphi_n\rangle \\ &= \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|\varphi_n\rangle \end{aligned}$$

et les valeurs propres de H sont de la forme $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, $n \in \mathbf{N}$. L'énergie de l'oscillateur harmonique est quantifiée. Le niveau d'énergie fondamentale correspond à $n = 0$, $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

2.4.4 Les états propres de H :

1. Dégénérescence des valeurs propres de H :

Les états propres de H sont ceux de N et d'après le lemme2 doivent vérifier $a|\varphi_0\rangle = 0$. Quelle est la dégénérescence de E_0 ?

Pour cela cherchons le nombres de ket linéairement indépendant verifiant $a|\varphi_0\rangle = 0$. On a

$$a|\varphi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}}P)|\varphi_0\rangle = 0$$

et en représentation $\{|x\rangle\}$: $X|x\rangle = x|x\rangle$ et $P|x\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}|x\rangle$.

$$\langle x|a|\varphi_0\rangle = (\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{d}{dx})\varphi_0(x); \quad \text{où } \langle x|\varphi_0\rangle = \varphi_0(x)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi_0(x)}{\varphi_0(x)} &= -\frac{m\omega}{\hbar}x dx \\ \Rightarrow \varphi_0(x) &= Ce^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \end{aligned} \quad (2.5)$$

C est une constante d'intégration. $\varphi_0(x)$ étant normé à l'unité, on trouve $C = \frac{m\omega}{\pi\hbar}$. Toutes les solutions de (2.5) verifiant $a|\varphi_0\rangle = 0$ sont proportionnelles. De ce fait, il n'existe qu'un seul vecteur propre $|\varphi_0\rangle$. Ainsi le niveau fondamentale n'est pas dégénéré et on montre par récurrence que tous les autres niveaux ne sont pas dégénérés.

2. Autres états propres de H en représentation $\{|\varphi_n\rangle\}$:

On peut construire les autres vecteurs propres de H à partir de $|\varphi_0\rangle$. Pour cela on considère la suite des vecteurs propres de N de valeurs propres respectives

$$a^\dagger|\varphi_0\rangle, (a^\dagger)^2|\varphi_0\rangle, (a^\dagger)^3|\varphi_0\rangle, \dots, (a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle;$$

$$1 \qquad 2 \qquad 3 \qquad \dots \qquad n$$

on a en plus les équations aux valeurs propres $N|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle$ et d'après le lemme2 $N(a|\varphi_n\rangle) = (n-1)a|\varphi_n\rangle$. Or à la valeur propre $(n-1)$ correspond un vecteur $|\varphi_{n-1}\rangle$ tel que $N|\varphi_{n-1}\rangle = (n-1)|\varphi_{n-1}\rangle$ c.à.d. $a|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_{n-1}\rangle$ sont proportionnels; autrement dit $a|\varphi_n\rangle = c_n|\varphi_{n-1}\rangle$. Calculons la constante de proportionnalité c_n . Pour cela calculons :

$$\begin{aligned} \|a|\varphi_n\rangle\|^2 &= |c_n|^2 \| |\varphi_{n-1}\rangle \|^2 \\ \langle \varphi_n | a^\dagger a | \varphi_n \rangle &= c_n c_n^* \langle \varphi_{n-1} | \varphi_{n-1} \rangle \\ \langle \varphi_n | N | \varphi_n \rangle &= c_n c_n^* \langle \varphi_{n-1} | \varphi_{n-1} \rangle \\ n \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle &= c_n c_n^* \langle \varphi_{n-1} | \varphi_{n-1} \rangle \quad \text{les } \{\varphi_n\} \text{ sont normé à l'unité} \end{aligned}$$

En prenant, par convention, c_n réel positif on aura $c_n = \sqrt{n}$ d'où $a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle$.

De la même façon on a $N|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle$ et d'après le lemme3 $N(a^\dagger|\varphi_n\rangle) = (n+1)a^\dagger|\varphi_n\rangle$. Or à la valeur propre $(n+1)$ correspond un vecteur $|\varphi_{n+1}\rangle$ tel que $N|\varphi_{n+1}\rangle = (n+1)|\varphi_{n+1}\rangle$ cela veut dire que $a^\dagger|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_{n+1}\rangle$ sont proportionnels; autrement dit $a^\dagger|\varphi_n\rangle = c_n|\varphi_{n+1}\rangle$. Calculons la constante de proportionnalité c_n . Pour cela calculons :

$$\begin{aligned} \|a^\dagger|\varphi_n\rangle\|^2 &= |c_n|^2 \| |\varphi_{n+1}\rangle \|^2 \\ \langle\varphi_n|aa^\dagger|\varphi_n\rangle &= c_n c_n^* \langle\varphi_{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle \\ \langle\varphi_n|(N+1)|\varphi_n\rangle &= c_n c_n^* \langle\varphi_{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle \\ (n+1)\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle &= c_n c_n^* \langle\varphi_{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle \end{aligned}$$

En prenant c_n réel positif on aura $c_n = \sqrt{n+1}$ d'où $a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$.

En résumé

$$\begin{aligned} a|\varphi_n\rangle &= \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle \\ a^\dagger|\varphi_n\rangle &= \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle \\ a|\varphi_0\rangle &= 0 \\ a^\dagger|\varphi_{n-1}\rangle &= \sqrt{n}|\varphi_n\rangle \\ |\varphi_n\rangle &= \frac{a^\dagger}{\sqrt{n}}|\varphi_{n-1}\rangle \\ |\varphi_{n-1}\rangle &= \frac{a^\dagger}{\sqrt{n-1}}|\varphi_{n-2}\rangle \\ |\varphi_n\rangle &= \frac{[a^\dagger]^2}{\sqrt{n!}\sqrt{(n-1)!}}|\varphi_{n-2}\rangle \dots \end{aligned}$$

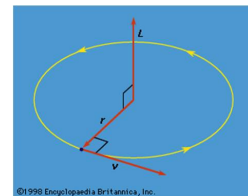
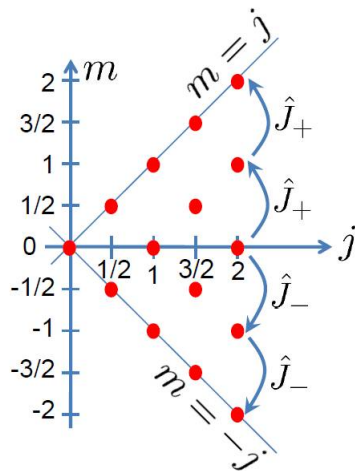
et par récurrence on montre que

$$\begin{aligned} |\varphi_1\rangle &= \frac{a^\dagger}{\sqrt{1}}|\varphi_0\rangle \\ |\varphi_n\rangle &= \frac{[a^\dagger]^n}{\sqrt{n!}}|\varphi_0\rangle \end{aligned}$$

Chapitre 3

Le moment cinétique orbital

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$$



Si r est perpendiculaire à p , le mouvement est circulaire.

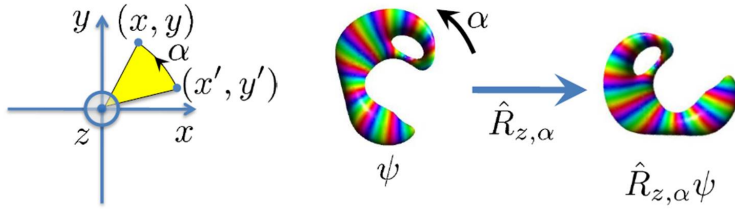
3.1 Introduction

Ce chapitre nécessite un minimum de connaissance sur le formalisme mathématique et les postulats de la mécanique quantique.

3.2 Moments cinétiques et rotations

On considère la rotation, $\hat{R}_{z,\alpha}$, d'angle α autour de l'axe Oz d'une fonction $\psi(x, y, z)$ qui au point (x, y, z) associe le point (x', y', z')

$$\begin{cases} x' = x \cos \alpha + y \sin \alpha \\ y' = -x \sin \alpha + y \cos \alpha \\ z' = z \end{cases} \quad (3.1)$$



$$\begin{aligned} \hat{R}_{z,\alpha} \psi(x, y, z) &= \psi(x', y', z') \\ &= \psi(x \cos \alpha + y \sin \alpha, -x \sin \alpha + y \cos \alpha, z) \end{aligned} \quad (3.2)$$

Pour une rotation infinitésimale ($\alpha \gg \pi$) autour de l'axe (Oz)

$$\begin{aligned} \hat{R}_{z,\alpha} \psi(x, y, z) &\approx \psi(x \cos \alpha + y \sin \alpha, -x \sin \alpha + y \cos \alpha, z) \\ &\approx \psi(x + y\alpha, -x\alpha + y, z) \\ &\approx \psi(x, y, z) - \alpha \frac{i}{\hbar} (xp_y - yp_x) \psi(x, y, z) \\ &\approx \left(I - \frac{i\alpha}{\hbar} L_z \right) \psi(x, y, z) \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\Rightarrow \hat{R}_{z,\alpha} \approx \left(I - \frac{i\alpha}{\hbar} L_z \right) \quad (3.4)$$

On dit que les moments cinétique L_x , L_y et L_z sont les générateurs infinitésimaux du groupe des rotations

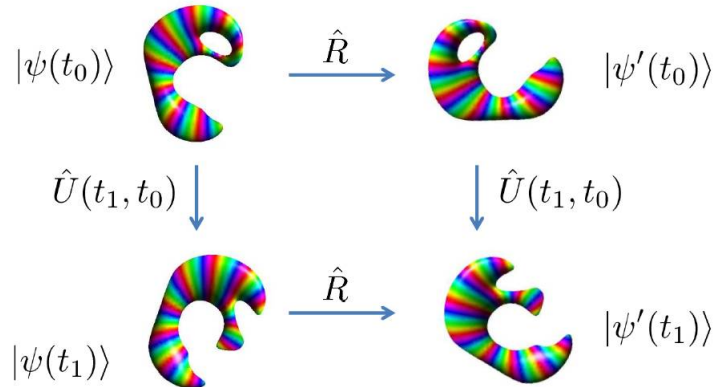
3.3 Invariance par rotation et moment cinétique

Soit un système décrit par le ket $|\psi(t)\rangle$ et soit $U(t, t_0)$ son opérateur d'évolution c.à.d.

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad t_0 \text{ temps initial} \quad (3.5)$$

et soit une rotation $\hat{R}_{z,\alpha}$ c.à.d.

$$|\psi'(t)\rangle = \hat{R}_{z,\alpha}|\psi(t)\rangle. \quad (3.6)$$



On a à $t = t_0$, $|\psi'(t_0)\rangle = \hat{R}_{z,\alpha}|\psi(t_0)\rangle$ et $|\psi'(t_1)\rangle = U(t_1, t_0)|\psi(t_0)\rangle$.
Ainsi suivant le chemin évolution-rotation, on obtient

$$\begin{aligned} |\psi'(t_1)\rangle &= \hat{R}_{z,\alpha}|\psi(t_1)\rangle \\ &= \hat{R}_{z,\alpha}U(t_1, t_0)|\psi(t_0)\rangle \end{aligned} \quad (3.7)$$

et suivant le chemin rotation-évolution, on obtient

$$\begin{aligned} |\psi'(t_1)\rangle &= U(t_1, t_0)|\psi'(t_0)\rangle \\ &= U(t_1, t_0)\hat{R}_{z,\alpha}|\psi(t_0)\rangle \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$[\hat{R}_{z,\alpha}, U(t_1, t_0)] = 0 \quad (3.9)$$

En plus on a, au voisinage de t_0 ,

$$\begin{aligned} \psi(t') &= \psi(t_0) + (t' - t_0)\frac{d\psi}{dt}(t_0) + \dots \\ &\approx \psi(t_0) - dt\frac{i}{\hbar}H\psi(t_0), \end{aligned} \quad (3.10)$$

pour $t' = t_0 + dt$ et H étant l'hamiltonien du système.

$$\begin{aligned}\psi(t') &= U(t', t_0)\psi(t_0) \\ \implies U(t', t_0) &\approx I - \frac{idt}{\hbar}H \\ \xrightarrow{(3.9)} [\hat{R}_{z,\alpha}, H] &= 0\end{aligned}\tag{3.11}$$

$$\xrightarrow{(3.4)} [L_z, H] = 0\tag{3.12}$$

Ce résultat est vrais quelque soit l'axe et l'angle de rotation.

$$[L_x, H] = 0, \quad [L_y, H] = 0 \quad \text{et} \quad [L_z, H] = 0\tag{3.13}$$

On peut par conséquent trouver une base commune à H et l'une des composantes de $\vec{L}$.

3.4 Commutation des moments cinétiques

$$[L_i, L_j] = i\hbar L_k$$

On ne peut pas connaître simultanément les différentes composantes du moment cinétique (ils n'ont pas de vecteurs propres communs, puisque le résultat de mesure donne une valeur propre et le système se retrouve dans l'état propre associé).

3.5 L'observable L^2

La norme du moment cinétique s'écrit

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

En utilisant la relation de commutation suivante

$$[A, B^2] = [A, B]B + B[A, B]$$

On obtient

$$[L_z, L_x^2] = [L_z, L_x]L_x + L_x[L_z, L_x] = i\hbar L_y L_x + L_x i\hbar L_y$$

$$[L_z, L_y^2] = [L_z, L_y]L_y + L_y[L_z, L_y] = -i\hbar L_x L_y - L_y i\hbar L_x$$

$$[L_z, L_z^2] = 0$$

donc

$$[L_z, L^2] = 0$$

De même

$$[L_x, L^2] = 0 \quad \text{et} \quad [L_y, L^2] = 0$$

L'opérateur L^2 commute avec chacune de composantes de l'opérateur $\vec{L}$. Il est donc possible de mesurer simultanément la norme du moment cinétique et l'une de ses composantes (on prendra dans la suite celle dans la direction de l'axe Oz , L_z). Ainsi, on pourra leur trouver une base commune de vecteurs propres.

Et puisque $[H, L^2] = 0$ et $[H, L_i] = 0$, ($i = x, y, z$), on peut par conséquent trouver une base commune à H , L^2 et l'une des composantes de $\vec{L}$. Traditionnellement, on choisit $\{H, L^2, L_z\}$.

3.6 Moment cinétique intrinsèque ou Spin $\vec{S}$

3.7 Moment cinétique général $\vec{J}$

Soient l'observable $\vec{J}$ de composantes J_x , J_y et J_z et l'observable $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ telles que

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z, \quad [J_y, J_z] = i\hbar J_x, \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y \quad (3.14)$$

$$[J^2, J_x] = 0, \quad [J^2, J_y] = 0, \quad [J^2, J_z] = 0 \quad (3.15)$$

On voit bien que les observables moment cinétique orbitale $\vec{L}$ et spin $\vec{S}$ des électrons obéissent à ces relations.

3.7.1 Etats et valeurs propres communs de $\{J^2, J_z\}$

D'après (3.15), les observables J^2 et J_z commutent. On peut donc former une base de ket propres commun à J^2 et J_z . Soit $|\psi\rangle$ un de ces vecteurs propres de valeur propres respectives $a\hbar^2$ et $m\hbar$ telles que

$$J^2|\psi\rangle = a\hbar^2|\psi\rangle \quad \text{et} \quad J_z|\psi\rangle = m\hbar|\psi\rangle \quad (3.16)$$

$$\langle \psi | J^2 | \psi \rangle = \sum_{i=x,y,z} \langle \psi | J_i^\dagger J_i | \psi \rangle = \sum_{i=x,y,z} \langle \psi | J_i J_i | \psi \rangle = \sum_{i=x,y,z} \| J_i | \psi \rangle \|^2 \geq 0$$

Les valeurs propres de J^2 sont positives ou nulles ($a \geq 0$). On pose $a = j(j+1)$ et pour simplifier on note le ket propre $|\psi\rangle = |j, m\rangle$. On appelle $\mathcal{E}_{j,m}$ l'espace propre commun à J^2 et J_z associé aux valeurs propres respectives $j(j+1)\hbar^2$ et $m\hbar$.

$$J^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \quad \text{et} \quad J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \quad (3.17)$$

3.7.2 Les opérateurs $\{J_+, J_-\}$

Soient les opérateurs¹ $J_+ = J_x + iJ_y$ et $J_- = J_x - iJ_y$ qui sont adjoints l'un de l'autre c.à.d. $J_+^\dagger = J_-$ et vice versa. Par conséquent ces opérateurs ne sont pas des observables. Ces opérateurs obéissent aux relations de commutations suivantes

$$[J^2, J_\pm] = 0 \quad \text{et} \quad [J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm \quad (3.18)$$

On peut montrer aussi que

$$J_+ J_- = (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z \quad (3.19)$$

et

$$J_- J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z \quad (3.20)$$

Par conséquent

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (3.21)$$

3.7.3 Quantification

Sachant que $[J_z, J_+] = \hbar J_+$, on a

$$\begin{aligned} J_z J_+ |j, m\rangle &= J_+ J_z |j, m\rangle + \hbar J_+ |j, m\rangle \\ &= m\hbar J_+ |j, m\rangle + \hbar J_+ |j, m\rangle = (m+1)\hbar J_+ |j, m\rangle \end{aligned} \quad (3.22)$$

1. de façon semblable aux opérateurs d'annihilation a et de création $a^\dagger$ pour l'oscillateur harmonique

et comme $[J^2, J_+] = 0$, on obtient

$$J^2 J_+ |j, m\rangle = J_+ J^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 J_+ |j, m\rangle \quad (3.23)$$

ce qui montre que si $|j, m\rangle$ est ket propre commun à J_z et J^2 associé aux valeurs propres $m\hbar$ et $j(j+1)\hbar^2$ respectivement, alors $J_+ |j, m\rangle$ est aussi ket propre commun à J_z et J^2 associé aux valeurs propres $(m+1)\hbar$ et $j(j+1)\hbar^2$ respectivement. On montre également que $J_- |j, m\rangle$ est aussi ket propre commun à J_z et J^2 associé aux valeurs propres $(m-1)\hbar$ et $j(j+1)\hbar^2$ respectivement.

La norme de ces nouveaux ket propres, qui représente la clef de la quantification, est donnée par

$$\begin{aligned} \left\| J_+ |j, m\rangle \right\|^2 &= \langle j, m | J_+^\dagger J_+ |j, m\rangle = \langle j, m | J_- J_+ |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | J^2 |j, m\rangle - \langle j, m | J_z^2 |j, m\rangle - \hbar \langle j, m | J_z |j, m\rangle \\ &= (j(j+1) - m(m+1)) \hbar^2 \left\| |j, m\rangle \right\|^2 \end{aligned} \quad (3.24)$$

Ce qui montre que la quantité $(j(j+1) - m(m+1))$ est positive ou nulle. On peut regarder cette quantité comme un polynôme du second degré en m : $-m^2 - m + j(j+1)$. L'une de ces racines est $m = j$, et puisque le produit des racines est égale à $-j(j+1)$, l'autre racine est $-(j+1)$. En se rappelant que j est positive, le signe du polynôme est positive entre les racines. D'où la première contrainte

$$-(j+1) \leq m \leq j \quad (3.25)$$

De même pour l'autre ket

$$\left\| J_- |j, m\rangle \right\|^2 = (j(j+1) - m(m-1)) \hbar^2 \left\| |j, m\rangle \right\|^2$$

et on obtient la contrainte

$$-j \leq m \leq (j+1) \quad (3.26)$$

La valeur de m doit vérifier les deux contraintes simultanément c.à.d.

$$-j \leq m \leq j \quad (3.27)$$

Soit le ket propre $|j, m\rangle$ avec $-j \leq m \leq j$. L'application successive de l'opérateur J_+ nous donne à une constantes de normalisation près, les ket propres suivants $|j, (m+1)\rangle, |j, (m+2)\rangle, \dots$ etc. Soit la p^{eme} action $J_+^p |j, m\rangle = cte |j, (m+p)\rangle$. Pour $m+p = j$, l'action de J_+^p donne un vecteur nul ce qui implique que $j-m$ doit être un entier p . L'action de J_+^p donne $|j, (m+1)\rangle, |j, (m+2)\rangle, \dots |j, (m+p)\rangle = |j, j\rangle$ et les autres vecteurs sont nuls.

De la même façon, $J_-^q |j, m\rangle = cte |j, (m-q)\rangle$ et l'action de J_-^q donne $|j, (m-1)\rangle, |j, (m-2)\rangle, \dots |j, (m-q)\rangle = |j, -j\rangle$ et les autres vecteurs sont nuls.

On aura donc à la fois

$$\left\{ \begin{array}{ll} j-m = p & p \in \mathbb{N} \\ j+m = q & q \in \mathbb{N} \end{array} \right\} \implies 2j = p+q \in \mathbb{N} \quad et \quad -j \leq m \leq j \quad (3.28)$$

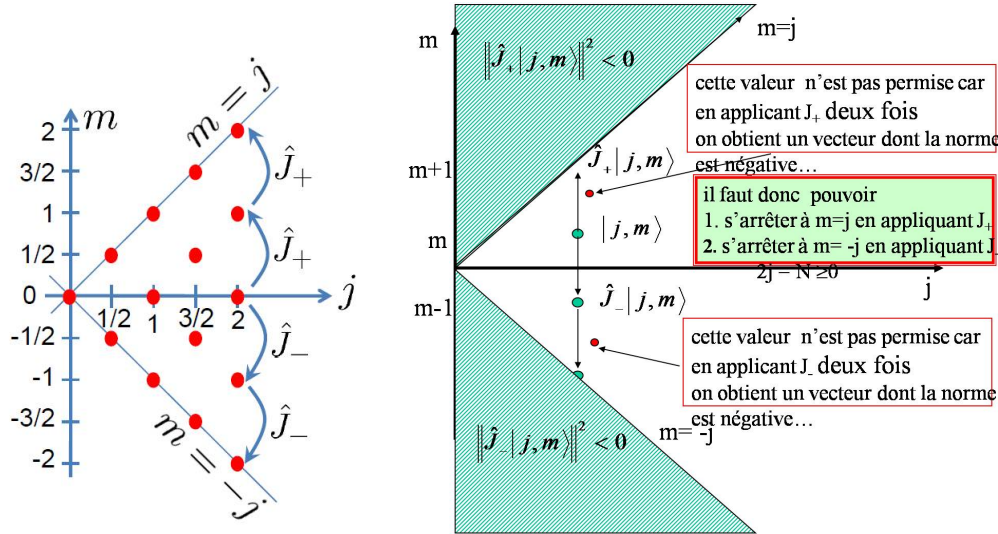
ou encore

$$\left\{ \begin{array}{l} j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\} \\ m \in \{-j, -j+1, \frac{3}{2}, \dots, j\} \end{array} \right. \quad (3.29)$$

Si p et q sont de même parités, alors j et m sont entiers. C'est le cas des particules dans un potentiel central.

Si p et q sont de parités opposées, alors j et m sont demi entiers. C'est le cas des particules de spin de l'électron ayant $j = 1/2$.

j	m	vp de J^2	vp de J_z
0	0	0	0
1/2	1/2 et -1/2	$3\hbar^2/4$	$\hbar/2$ et $-\hbar/2$
1	1, 0 et -1	$2\hbar^2$	$\hbar$, 0 et $-\hbar$
.	...	.	...

TABLE 3.1 – Les valeurs propres de J^2 et J_z 

On peut montrer que l'action de $J_{\pm}$ sur le ket $|j, m\rangle$ est (voir T.D.)

$$J_+|j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j(j+1) - m(m+1))}|j, m+1\rangle \quad (3.30)$$

$$J_+|j, j\rangle = 0 \quad (3.31)$$

et

$$J_-|j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j(j+1) - m(m-1))}|j, m-1\rangle \quad (3.32)$$

$$J_-|j, -j\rangle = 0 \quad (3.33)$$

3.8 Application au moment cinétique orbital

Pour traiter cette application il va falloir revenir au formalisme des fonctions d'onde et laisser de côté un moment le beau formalisme des kets et des bras.

3.8.1 Coordonnées sphériques

Les coordonnées cartésiennes (x, y, z) et sphériques (r, θ, φ) d'un point M sont reliées par

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (3.34)$$

où r est la distance du point M à l'origine, θ l'angle entre l'axe Oz et OM et φ l'angle entre les plans xOy et MOz . On a

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial r} \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z} \end{cases} \quad (3.35)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial r} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x} + \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial y} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} = r \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x} + r \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial y} - r \sin \theta \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} = -r \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x} + r \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial y} \end{cases} \quad (3.36)$$

En fait, on a besoin d'exprimer les dérivées partielles par rapport aux coordonnées cartésiennes en fonction de celle par rapport aux sphériques. Après élimination et additionnement et un peu de trigonométrie, on arrive aux résultats suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r \sin \theta} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \end{cases} \quad (3.37)$$

3.8.2 Opérateurs en coordonnées sphériques

On a

$$\begin{cases} L_x = yp_z - zp_y \implies L_x = Y(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial z} - Z(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial y} \\ L_y = zp_x - xp_z \implies L_y = Z(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} - X(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial z} \\ L_z = xp_y - yp_x \implies L_z = X(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial y} - Y(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \end{cases}$$

En utilisant les relations ci-dessus (3.37), on obtient

$$\begin{cases} L_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_y = -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{cases} \quad (3.38)$$

où $\cot \theta = \sin \theta / \cos \theta$.

On obtient également

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (3.39)$$

$$L_+ = \hbar e^{+i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3.40)$$

$$L_- = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3.41)$$

3.8.3 Fonctions propres

Nous allons chercher les fonctions propres de L^2 et L_z associées aux valeurs propres $l(l+1)\hbar^2$ et $m\hbar$ respectivement. Ces fonctions propres seront écrites en coordonnées sphériques sous la forme $\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \varphi)$.

Remarquons que l'expression des opérateurs L^2 et L_z ne fait intervenir que les variables θ et φ (c.à.d. pas de variable r). les fonctions propres $\psi(r, \theta, \varphi)$ de L^2 et L_z permettent d'écrire cette fonction en produit de deux fonctions l'une $Y(\theta, \varphi)$, ne dépendant que de θ et φ , appelée harmonique sphérique et l'autre $R(r)$, ne dépendant que de r . l'importance de cette dernière apparaîtra une fois nous préciserons le potentiel $V(r)$.

$$\psi(r, \theta, \varphi) = Y(\theta, \varphi)R(r) \quad (3.42)$$

Lors de la recherche des fonctions propres de L^2 et L_z , la fonction $R(r)$ n'intervient pas et par conséquent on ne la considérera plus dans la suite

Fonctions propres de L_z

Si $\psi(\vec{r})$ est fonction propre de $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ avec la valeur λ , alors

$$L_z \psi(\vec{r}) = \lambda \psi(\vec{r}) = \lambda Y(\theta, \varphi) R(r) \implies \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned} L_z Y(\theta, \varphi) &= \lambda Y(\theta, \varphi) \implies \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \implies Y(\theta, \varphi) = e^{i\lambda\varphi/\hbar} F(\theta) \end{aligned} \quad (3.44)$$

or en coordonnées sphérique, on a $\psi(r, \theta, \varphi + 2\pi) = \psi(r, \theta, \varphi)$ ou encore

$$Y(\theta, \varphi + 2\pi) = Y(\theta, \varphi) \implies \frac{2\pi\lambda}{\hbar} = 2\pi m, \quad \text{avec } m \text{ entier} \quad (3.45)$$

Les valeurs propres de L_z sont de la forme $m\hbar$ (ce qui confirme le choix de cette valeur déjà prise auparavant) et les fonctions propres associées sont de la forme $Y_m(\theta, \varphi) = e^{im\varphi} F_m(\theta)$, l'indice m réfère à la valeur propre $m\hbar$

Fonctions propres de L^2

Imposant maintenant que $Y(\theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi) = e^{im\varphi} F_{l,m}(\theta)$ est fonction propre de L^2 avec la valeur propre $l(l+1)\hbar^2$ c.à.d.

$$L^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 e^{im\varphi} F_{l,m}(\theta) \quad (3.46)$$

Les indices l et m sont relative aux valeurs propres $l(l+1)\hbar^2$ et $m\hbar$. et puisque qu'on a déjà vue que $-l \leq m \leq l$ avec un incrément de 1 et on sait que m est un entier alors l est aussi entier.

3.8.4 Détermination de la fonction $F_{l,m}(\theta)$

Pour déterminer la fonction $F_{l,m}(\theta)$, il faut se rappeler qu'on a vue, dans le chapitre moment cinétique général, que pour $m = j$, on a $J_+ |j, j\rangle = 0$. Dans notre cas

$$\begin{aligned} L_+ Y_{l,l} &= 0 \\ \implies \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{il\varphi} F_{l,l}(\theta) &= 0 \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) F_{l,l}(\theta) = 0$$

La solution de cette équation différentielle de premier ordre est unique

$$F_{l,l}(\theta) = c_l (\sin \theta)^l \quad (3.48)$$

où c_l est une constante d'intégration qu'on déterminera par normalisation. La fonction propres pour $m = l$ s'écrit alors comme

$$Y_{l,l}(\theta, \varphi) = c_l (\sin \theta)^l e^{il\varphi} \quad (3.49)$$

Pour trouver les autres fonctions propres on applique L_- et on obtient $Y_{l-1,l}$ et ainsi de suite jusqu'à obtenir $Y_{-l,l}$. On peut monter, par analogie de l'action de $J_\pm$ sur $|l, m\rangle$ Eqs. (3.30) et (3.32), que l'action de $L_\pm$ sur les harmoniques sphériques $Y_{l,m}$ s'écrit

$$L_\pm Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_{l,m \pm 1}(\theta, \varphi) \quad (3.50)$$

Pour calculer la constante de normalisation on procède comme suit :

En coordonnées sphériques, le volume élémentaire est $r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$, en plus les fonctions d'ondes sont normalisées c.à.d.

$$\iiint |\psi|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = \int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr \times \iint |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1 \quad (3.51)$$

on convient à ce que la partie radiale est telle que $\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1$ et par conséquent

$$\begin{aligned} 1 &= \iint |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = \int_0^\pi |F_{l,m}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \times \int_{-\pi}^\pi |e^{im\varphi}|^2 d\varphi \\ &= 2\pi \int_0^\pi |F_{l,m}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \end{aligned} \quad (3.52)$$

Dans le cas de l'harmonique sphérique $l = m$

$$1 = \iint |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 2\pi |c_l|^2 \int_0^\pi \sin^{2l} \theta \sin \theta d\theta \quad (3.53)$$

pour le cas $l = 0$ on trouve, à une phase globale près, $c_0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ et par conséquent

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (3.54)$$

De la même façon, on peut calculer les autres harmoniques sphériques en posant (pour $l \neq 0$) $I_{2l} = \int_0^\pi \sin^{2l} \theta \sin \theta d\theta$

$$\begin{aligned} I_{2l} &= \int_0^\pi \sin^{2l} \theta d(-\cos \theta) = [\sin^{2l} \theta (-\cos \theta)]_0^\pi \\ &\quad + \int_0^\pi \cos \theta d(\sin^{2l} \theta) = 0 + 2l \sin^{2l-1} \theta \cos^2 \theta d\theta = 2l \sin^{2l-1} \theta (1 - \sin^2 \theta) d\theta \\ &= 2l (I_{2l-2} - I_{2l}) \end{aligned} \quad (3.55)$$

d'où par récurrence et sachant que $Y_{l,l}(\theta, \varphi) = c_l (\sin \theta)^l e^{il\varphi}$ (Eq. (3.49)) et à une phase globale près, $c_l = \frac{1}{\sqrt{2\pi I_{2l}}}$

$$\begin{cases} I_0(l=0) = 2 \\ I_2(l=1) = \frac{2}{3}I_0 = \frac{2}{3} \cdot 2 = \frac{4}{3} \\ I_4(l=2) = \frac{4}{5}I_2 = \frac{4}{5} \cdot \frac{4}{3} = \frac{16}{15} \\ etc. \end{cases} \implies \begin{cases} Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_{1,1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \\ Y_{2,2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi} \\ etc. \implies etc. \end{cases}$$

Sachant qu'on a pu calculer les $Y_{l,l}(\theta, \varphi)$, les $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ peuvent aussi être construites², à partir des $Y_{l,l}(\theta, \varphi)$, en partant de l'expression différentielle de L_- (Eq. (3.41))

$$L_- = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3.57)$$

2. Ces fonctions propres doivent être normalisées c.à.d ; ont la forme

$$Y_{l,m-1}(\theta, \varphi) = \frac{e^{i\alpha}}{\hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}} L_- Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.56)$$

et de l'Eq. (3.50)

$$Y_{l,m-1}(\theta, \varphi) = \pm \frac{1}{\hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}} L_- Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (3.58)$$

$$= \pm \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}} \left(-\frac{\partial Y_{l,m}}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial Y_{l,m}}{\partial \varphi} \right) \quad (3.59)$$

Exemple : Calculer $Y_{1,0}$ c.à.d. $l = 1$ et $m = 1$. On sait que $Y_{1,1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$

$$Y_{1,0} = \pm \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2}} \left(-\frac{\partial Y_{1,1}}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial Y_{1,1}}{\partial \varphi} \right) \quad (3.60)$$

$$= \pm \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (-\cos \theta e^{i\varphi} - \cot \theta \sin \theta e^{i\varphi}) \quad (3.61)$$

$$= \pm \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \times -\cos \theta = \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \times \cos \theta \quad (3.62)$$

On prend généralement le signe " + " : $Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$.
De même pour $l = 1$ et $m = 0$, on obtient

$$Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \varphi \quad (3.63)$$

Chapitre 4

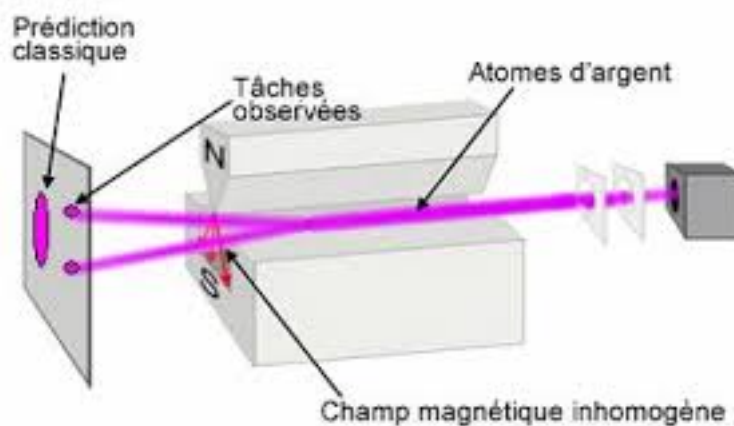
Particules de spin $\frac{1}{2}$

4.1 Introduction

Il s'agit dans ce chapitre d'illustrer les postulats de la mécanique quantique sur des cas concrets simples, où l'espace des états est de dimension 2 (fini). L'intérêt de ce chapitre est aussi d'ordre physique, on mettra en évidence des effets typiquement quantique qui sont susceptibles d'être vérifiés expérimentalement : le spin n'a pas d'analogue en mécanique classique.

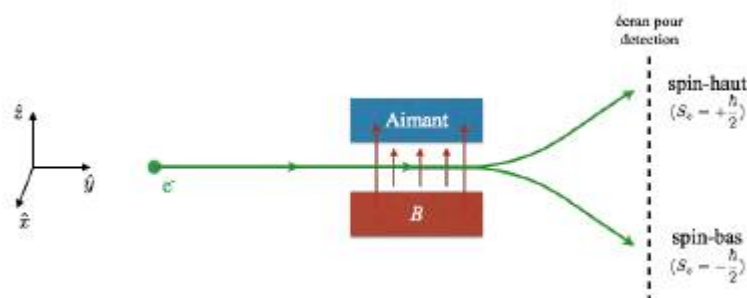
L'électron était la première particule dont le spin a été détecté.

4.2 Expérience de Stern-Gerlach



4.2.1 Expérience :

Cette expérience a été réalisée en 1921, son principe consiste à envoyer un jet d'atomes neutres paramagnétiques (dans l'expérience originale, on a utilisé l'Argent) dans un champ magnétique fortement inhomogène.



Les caractéristiques

du champ magnétique $\vec{B}$ sont :

- $\vec{B}$ est le même sur une même parallèle à Oy .
- $\vec{B}$ n'a pas de composante suivant Oy ,
- Sa plus grande composante est suivant Oz et varie fortement avec z .
Puisque $\vec{\nabla} \vec{B} = 0$, il y a aussi une composante suivant Ox qui varie avec x .

4.2.2 Prévision classique :

- les atomes d'Argent sont neutres, donc pas de force de Laplace.
- Les atomes sont paramagnétiques, donc ils possèdent un moment magnétique permanent $\vec{M}$, et les forces qui en résultent dérivent de l'énergie potentielle :

$$W = -\vec{M} \cdot \vec{B}, \quad (4.1)$$

le moment cinétique $\vec{L}$ est relié à $\vec{M}$ par la relation :

$$\vec{M} = -\gamma \vec{L}, \quad (4.2)$$

où γ est appelé rapport gyromagnétique. Etant donné les caractéristiques de $\vec{B}$ on montre que les moyennes des composantes M_x et M_y sont nulles et ainsi la force agissant sur les atomes est donnée par :

$$\vec{F} = M_z \vec{\nabla} B_z,$$

de plus $\frac{\partial B_z}{\partial x} = \frac{\partial B_z}{\partial y} = 0$ ce qui implique que la force subit par l'atome est parallèle à l'axe Oz ($\vec{F} = M_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \vec{k}$). C'est cette force qui produit la déviation HN de l'atome :

Mesurer HN revient en fait à mesurer M_z ou L_z .

Puisque les moments des différents atomes sont orientés au hasard ayant la traversée de l'entrefer (toutes les valeurs de M_z comprises entre $|\vec{M}|$ et $-|\vec{M}|$ sont réalisées), on s'attend à ce que le jet formera sur l'écran une seule tache symétrique par rapport à H . Ces prévisions à partir de la théorie classique sont en contradiction avec ce qu'on observe expérimentalement ; **on n'observe pas une seule tache mais deux taches centrées en N_1 et N_2 symétriques par rapport à H .**

Ainsi les résultats de l'expérience nous amènent à conclure que :
Puisque les atomes d'argent sont dans leur état fondamental (Ils n'ont pas de moment angulaire orbital dû à la rotation des charges), alors l'existence de $\vec{M}$ ne peut être dû qu'à l'électron externe auquel on associe un moment cinétique $\vec{L}$ dit **moment intrinsèque ou de spin**. Ainsi tous les électrons ont un moment magnétique avec la même valeur absolue ($|HN_1| = |HN_2|$) et deux orientations possibles : parallèle et antiparallèle à la direction du champ magnétique. L_z est une grandeur **quantifiée** et on admet ici que les valeurs de la mesure sont $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$. L'électron est dit de **spin $\frac{1}{2}$** .

4.3 Description mathématique de spin $\frac{1}{2}$:

4.3.1 L'espace des états du spin et observable S_z :

L_z est une grandeur physique, donc on lui associe une observable, qu'on note par S_z , dont les valeurs propres sont $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$. On **admet** que ces deux valeurs propres sont **nondégénérées** et on note les états propres correspondants respectivement par $|+\rangle$ et $|-\rangle$, c-à-d :

$$S_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle, \quad S_z|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle, \quad (4.3)$$

avec :

$$\langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1, \quad \langle +|-\rangle = 0.$$

L'espace des états de spin est de dimension deux, qu'on note par $\mathcal{E}_s$. On a ainsi :

- S_z forme à elle seule un *E.C.O.C*
- $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ est une base de $\mathcal{E}_s$: (R.F) $|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-| = \mathbf{1}$.
- Un état quelconque de $\mathcal{E}_s$ (normé) s'écrit de façon générale sur cette base comme :

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

- dans la base $\{|\pm\rangle\}$ la matrice associée à S_z s'écrit :

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

4.3.2 Observables S_x et S_y :

On associe aux composantes L_x et L_y respectivement les observables S_x et S_y et on admet qu'elles ont les mêmes valeurs propres que S_z : $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$. Les états propres correspondants sont notés $|+\rangle_x$ et $|-\rangle_x$ pour S_x et $|+\rangle_y$ et $|-\rangle_y$ pour S_y :

$$S_x|\pm\rangle_x = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle_x; \quad S_y|\pm\rangle_y = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle_y.$$

S_x et S_y peuvent être représentées dans la base $\{|\pm\rangle\}$ par des matrices 2×2 hermitiques. Ces matrices sont (admettons ce résultat) :

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

En général dans une direction quelconque $\vec{u} \equiv (\sin(\theta) \cos(\varphi), \sin(\theta) \sin(\varphi), \cos(\theta))$, on peut associer à $L_u = \vec{L} \cdot \vec{u}$ l'observable : $S_u = \vec{S} \cdot \vec{u} = S_x u_x + S_y u_y + S_z u_z$ qui s'écrit dans la base $\{|\pm\rangle\}$ sous forme :

$$S_u = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta)e^{-i\varphi} \\ \sin(\theta)e^{i\varphi} & -\cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

les valeurs propres de S_u sont toujours $\pm\frac{\hbar}{2}$, et les états propres associés sont notés $|\pm\rangle_u$. On voit ainsi que toutes les observables S_z , S_x , S_y et S_u

ont les mêmes valeurs propres. Ceci n'a rien de surprenant physiquement, puisque une rotation de l'appareil de Stern-Gerlach ne doit pas changer les phénomènes observés. Pour les vecteurs propres de chaque observable on a dans la base $\{|\pm\rangle\}$:

(v.p)	$\frac{\hbar}{2}$	$-\frac{\hbar}{2}$
S_x	$ +\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(+\rangle + -\rangle)$	$ -\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(+\rangle - -\rangle)$
S_y	$ +\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(+\rangle + i -\rangle)$	$ -\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(+\rangle - i -\rangle)$
S_u	$ +\rangle_u = \cos(\frac{\theta}{2})e^{-i\varphi/2} +\rangle + \sin(\frac{\theta}{2})e^{i\varphi/2} -\rangle$	$ -\rangle_u = -\sin(\frac{\theta}{2})e^{-i\varphi/2} +\rangle + \cos(\frac{\theta}{2})e^{i\varphi/2} -\rangle$

4.4 Illustration des postulats :

Il s'agit d'effectuer des expériences, à l'aide d'appareils de Stern-Gerlach afin d'appliquer les postulats de la mécanique quantique.

4.4.1 Préparation des états et mesure de spin :

Pour avoir des prédictions sur le résultat d'une mesure, il faut connaître l'état du système (ici le spin) avant la mesure.

a- Préparation des états :

Prenons le champ magnétique $\vec{B}$ parallèle à Oz , ceci permettra de préparer les états $|+\rangle$ ou $|-\rangle$:

On perce un trou en N_1 , certains atomes franchissent le plan (P) et continuent leurs chemins à droite de ce plan (P). Avec cette expérience on a effectué une mesure sur S_z , le résultat est $+\hbar/2$, or d'après le postulat 5, l'état de ces atomes après la mesure est $|+\rangle$ (S_z est un *E.C.O.C*).

Ce dispositif fournit un jet d'atomes tous dans l'état $|+\rangle$, il fonctionne ainsi comme un **polariseur atomique**.

De même si on perse en N_2 on aura un jet d'atomes tous dans l'état $|-\rangle$.

Remarques :

- On peut de même préparer des jets d'atomes tous dans des états $|\pm\rangle_x$, $|\pm\rangle_y$, ou bien en général dans $|\pm\rangle_u$. Pour cela il suffit de tourner l'appareil de Stern et Gerlach de sorte de mettre le champ $\vec{B}$ respectivement

dans le même sens que Ox , Oy ou bien en général $\vec{u}$ et ensuite faire un trou en N_1 ou N_2 .

- Si l'état du système avant la mesure est le plus général de l'espace des états de spin :

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1,$$

on montre qu'il existe toujours un vecteur unitaire $\vec{u}$ tel que $|\psi\rangle$ soit collinéaire à $|+\rangle_u$:

$$|\psi\rangle = e^{i\chi/2}(\cos(\theta/2)e^{-i\varphi/2}|+\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\varphi/2}|-\rangle) = e^{i\chi/2}|+\rangle_u \equiv |+\rangle_u \quad (4.7)$$

où (θ, φ) sont les angles caractérisant le vecteur $\vec{u}$ tels que :

$$\begin{cases} \cos(\theta/2) = |\alpha|, \quad \sin(\theta/2) = |\beta| \Rightarrow \tan(\theta/2) = |\frac{\beta}{\alpha}| \quad 0 \leq \theta \leq \pi; \\ \varphi = \arg(\beta) - \arg(\alpha), \\ \chi = \arg(\beta) + \arg(\alpha). \end{cases}$$

b- Mesures de spin :

On a vu que l'appareil de Stern et Gerlach permet de :

- Mesurer la composante de moment cinétique des atomes d'Argent le long d'une direction donnée.
- De préparer un jet d'atomes tous dans un état de spin donné.

Ceci nous permet de vérifier expérimentalement les postulats de la mécanique quantique, si on dispose deux électro-aimants de Stern et Gerlach l'un à la suite de l'autre. Le premier fonctionne comme un **polariseur**, le deuxième comme un **analyseur** (mesurer une composante déterminée de moment cinétique). * $\vec{B}_1$ parallèle à Oz , $\vec{B}_2$ parallèle à Oz :

On constate que tous les atomes qui franchissent (P_1) frappent (P_2) en N_1 , ce qui est en accord avec les prédictions de la mécanique quantique :

avant la mesure (avant de passer à travers A_2) l'état du système est dans l'état $|+\rangle$. Or $|+\rangle$ est état propre de S_z associé à la valeur propre $+\hbar/2$, donc si on mesure une seconde fois S_z on devrait obtenir **à coup sûr** la valeur propre $+\hbar/2$.

* $\vec{B}_1$ et $\vec{B}_2$ orientés différemment :

On observe que certains atomes viennent se condenser en N_1 et d'autres en

N_2 , bien qu'ils aient tous été préparés de la même manière.

Exemple : Soient $\vec{B}_1$ dans le plan (xoz) , $(\widehat{\vec{B}_1, \vec{Oz}}) = \theta$ et $\vec{B}_2 \parallel Oz$.

- Le polariseur prépare le système dans l'état :

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \quad (\varphi = 0)$$

- Analyseur mesure S_z , on obtient deux taches en N_1 et N_2 , c.à.d. on obtient :

$+\hbar/2$ avec la probabilité :

$$\mathcal{P}(\frac{\hbar}{2}) = |\langle +|\psi\rangle|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2}, \quad (4.8)$$

et $-\hbar/2$ avec la probabilité :

$$\mathcal{P}(-\frac{\hbar}{2}) = |\langle -|\psi\rangle|^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (4.9)$$

Expérimentalement on observe sur (P_2) que le nombre d'atomes qui arrivent en N_1 est proportionnel à $\cos^2 \frac{\theta}{2}$ et celui des atomes qui arrive en N_2 est proportionnel à $\sin^2 \frac{\theta}{2}$.

c- Valeurs moyennes :

Dans l'exemple qu'on vient de voir, expérimentalement, on remarque que sur un grand nombre $\mathcal{N}$ d'atomes on a :

$\mathcal{N} \cos^2 \frac{\theta}{2}$ qui arrivent en N_1 (mesure de S_z donne $\hbar/2$)

$\mathcal{N} \sin^2 \frac{\theta}{2}$ qui arrivent en N_2 (mesure de S_z donne $-\hbar/2$).

Ainsi la valeur moyenne de ces résultats est donnée par :

$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \left(\frac{\hbar}{2} \mathcal{N} \cos^2 \frac{\theta}{2} + \frac{\hbar}{2} \mathcal{N} \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) = \frac{\hbar}{2} \cos \theta$$

Théoriquement on retrouve le même résultat :

$$\langle \psi | S_z | \psi \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta.$$

De même si on mesure S_x (cette fois-ci $\vec{B}_2 \parallel Ox$), on trouve $\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta$ et théoriquement on a

$$\langle \psi | S_x | \psi \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta.$$

Remarque : On peut ici établir un lien entre la mécanique classique et la mécanique quantique à travers les valeurs moyennes. S'il s'agit d'un moment cinétique classique de module $\frac{\hbar}{2}$ dirigé suivant l'axe de "polariseur", et dont les composantes sont :

suisant Ox : $\frac{\hbar}{2} \sin \theta$, suisant Oz : $\frac{\hbar}{2} \cos \theta$.

De façon générale les valeurs moyennes de S_x , S_y et S_z dans un état $|+\rangle_u$ sont données par :

$$\begin{aligned} {}_u\langle + | S_x | + \rangle_u &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi \\ {}_u\langle + | S_y | + \rangle_u &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi \\ {}_u\langle + | S_z | + \rangle_u &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta \end{aligned} \quad (4.10)$$

Attention : Une mesure de composante de S , par exemple S_x , ne donne jamais $\frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi$ mais toujours $\pm \frac{\hbar}{2}$.

4.4.2 Evolution d'un spin 1/2 dans un champ magnétique uniforme :

Considérons un atome d'argent plongé dans un champ magnétique uniforme $\vec{B}_0$ tel que $\vec{B}_0 \parallel Oz$. L'énergie potentielle classique du moment magnétique (4.2) est :

$$W = -\vec{M} \cdot \vec{B} = -M_z B_0 = -\gamma B_0 L_z$$

où $B_0 = |\vec{B}|$. Posons $\omega_0 = -\gamma B_0$, et sachant que la règle de quantification fait correspondre à L_z l'observable S_z , alors l'hamiltonien qui décrit le système est donné par :

$$H = \omega_0 S_z. \quad (4.11)$$

On voit que H est indépendant du temps, donc la résolution de l'équation de schrodinger se ramène à celle de l'équation aux valeurs propres de H :

$$\begin{aligned} H|+\rangle &= \omega_0 S_z|+\rangle = \frac{\omega_0 \hbar}{2}|+\rangle = E_+|+\rangle \\ H|-\rangle &= \omega_0 S_z|-\rangle = -\frac{\omega_0 \hbar}{2}|-\rangle = E_-|-\rangle \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$\begin{array}{ll} E_+ - E_- = \hbar \omega_0 \propto B_0 & \begin{array}{c} E_+ \text{-----} |+\rangle \\ E_- \text{-----} |-\rangle \end{array} \\ \text{fréquence de Bohr unique :} & \\ \nu_{\pm} = \frac{1}{\hbar}(E_+ - E_-) = \frac{\omega_0}{2\pi} & \end{array}$$

Remarque :

- Si $\vec{B}_0 \parallel \vec{u}$ alors $H = \omega_0 S_u$ ($S_u = \vec{S} \cdot \vec{u}$).
- Pour l'atome d'argent, $\gamma < 0 \implies \omega_0 > 0$ ($E_+ > E_-$).

*** Précession de Larmor :**

Si à $t = 0$ l'état du système est donné par :

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle_u = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\varphi/2}|+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\varphi/2}|-\rangle,$$

alors à $t > 0$ on a :

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\varphi/2}e^{-iE_+t/\hbar}|+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\varphi/2}e^{-iE_-t/\hbar}|-\rangle \\ &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i(\varphi+\omega_0t)/2}|+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i(\varphi+\omega_0t)/2}|-\rangle. \end{aligned} \quad (4.13)$$

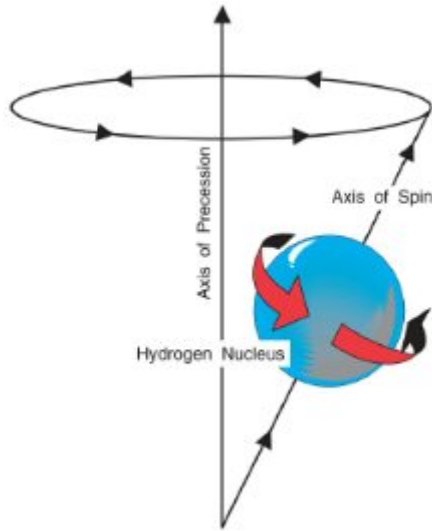
Ainsi la présence de $\vec{B}_0$ implique un déphasage proportionnel au temps entre les coefficients affectés aux kets $|+\rangle$ et $|-\rangle$. D'après (4.13) on a

$$|\psi(t)\rangle \equiv |+\rangle_u,$$

où la direction de $\vec{u}(t)$ suivant laquelle la composante de spin est $+\frac{\hbar}{2}$ avec certitude est définie par les angles polaires :

$$\begin{aligned} \theta(t) &= \theta \\ \varphi(t) &= \varphi + \omega_0 t, \end{aligned}$$

on voit que $\vec{u}(t)$ tourne autour de Oz (direction de $\vec{B}_0$) à la vitesse angulaire ω_0 (proportionnelle à $\vec{B}_0$). On retrouve ici un phénomène concernant le moment magnétique classique appelé **précession de Larmor**.



L'effet du champ $\vec{B}_0$ est de faire tourner le moment magnétique autour de $\vec{B}_0$ avec une vitesse angulaire constante : précession de Larmor

H ne dépend pas du temps, ainsi que S_z puisque $H = \omega_0 S_z$. De plus $[H, S_z] = 0$ ce qui implique que S_z est une constante de mouvement. On vérifie bien sur de l'expression de $|\psi(t)\rangle$ que dans une mesure de S_z on a $\mathcal{P}(\frac{\hbar}{2})$ et $\mathcal{P}(-\frac{\hbar}{2})$ sont indépendants du temps et

$$\langle \psi(t) | S_z | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta.$$

Par contre $[H, S_x] \neq 0$ et $[H, S_y] \neq 0$, ce qui implique que :

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \langle \psi(t) | S_x | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos(\varphi + \omega_0 t) \\ \langle S_y \rangle &= \langle \psi(t) | S_y | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin(\varphi + \omega_0 t) \end{aligned}$$

On remarque ainsi que $\langle S_x \rangle$, $\langle S_y \rangle$ et $\langle S_z \rangle$ se comportent comme les composantes d'un moment cinétique classique de module $\frac{\hbar}{2}$ qui serait animé du mouvement de précession de Larmor.

Chapitre 5

Produit tensoriel

5.1 Définition et Propriétés

Nous avons déjà parlé d'espace des états d'un système à partir de la notion de la fonction d'onde de la particule.

A une dimension, la fonction d'onde $\psi(x)$ qui appartient à l'espace des fonctions d'onde s'écrit comme $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ c.à.d. qu'on lui associe l'état du système $|\psi\rangle$ appartenant à l'espace des états $\mathcal{E}_x$.

A trois dimensions, la fonction d'onde est $\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z)$ et elle s'écrit comme $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$ c.à.d. qu'on lui associe l'état du système $|\psi\rangle$ appartenant à l'espace des états $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ qui est produit tensoriel des espaces des états $\mathcal{E}_x$, $\mathcal{E}_y$ et $\mathcal{E}_z$ qu'on note $\mathcal{E}_{\vec{r}} = \mathcal{E}_x \otimes \mathcal{E}_y \otimes \mathcal{E}_z$.

Un autre type d'espace des états construit par produit tensoriel est celui formé par l'espace des états des degré de liberté externe $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ et celui des degré de liberté interne tel que l'espace des états de spin $\mathcal{E}_s$ des particules ayant un spin. On note cet espace $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\vec{r}} \otimes \mathcal{E}_s$.

La notion de produit tensoriel (PT) joue un rôle important lorsqu'on considère deux systèmes physiques qui agissent dans deux espaces des états différents. En regroupant les deux systèmes en un seul et unique système, l'espace des états global de ce nouveau système est produit tensoriel d'espace des états de chaque système.

5.2 Définition et Propriétés

Soit $\mathcal{E}_1$ l'espace des états engendré par n_1 vecteurs de base $\{|u_i(1)\rangle\}$

Soit $|\phi(1)\rangle \in \mathcal{E}_1 \implies |\phi(1)\rangle = \sum_i a_i |u_i(1)\rangle$.

Et soit $\mathcal{E}_2$ l'espace des états engendré par n_2 vecteurs de base $\{|v_i(2)\rangle\}$

Soit $|\chi(2)\rangle \in \mathcal{E}_2 \implies |\chi(2)\rangle = \sum_i b_i |v_i(2)\rangle$.

On appelle produit tensoriel de $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ l'espace des états $\mathcal{E}$ qu'on note $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$.

Si à tout couple de vecteurs $|\phi(1)\rangle \in \mathcal{E}_1$ et $|\chi(2)\rangle \in \mathcal{E}_2$, on associe le vecteur de $\mathcal{E}$ noté

$$|\phi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle = |\phi(1)\rangle |\chi(2)\rangle = |\phi(1), \chi(2)\rangle$$

alors cette correspondance vérifie les conditions suivantes

1. La linéarité par rapport à la multiplication par un nombre complexe :

$$(\lambda |\phi(1)\rangle) \otimes |\chi(2)\rangle = |\phi(1)\rangle \otimes (\lambda |\chi(2)\rangle) = \lambda (|\phi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle)$$

2. la distributivité par rapport à l'addition vectorielle

$$(|\phi(1)\rangle + |\phi'(1)\rangle) \otimes |\chi(2)\rangle = |\phi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle + |\phi'(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$$

$$|\phi(1)\rangle \otimes (|\chi(2)\rangle + |\chi'(2)\rangle) = |\phi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle + |\phi(1)\rangle \otimes |\chi'(2)\rangle$$

3. Base dans $\mathcal{E}$

Si $\{|u_i(1)\rangle\}$ est une base orthonormée de $\mathcal{E}_1$ de dimension n_1

et $\{|v_i(2)\rangle\}$ est une base orthonormée de $\mathcal{E}_2$ de dimension n_2

alors l'ensemble $\{|u_i(1)\rangle \otimes |v_j(2)\rangle\}$ est une base orthonormée de $\mathcal{E}$ de dimension égale à $\dim \mathcal{E}_1 \times \dim \mathcal{E}_2 = n_1 \times n_2$.

Le produit tensoriel des vecteurs $|\phi(1)\rangle = \sum_i a_i |u_i(1)\rangle$ et

$|\chi(2)\rangle = \sum_j b_j |v_j(2)\rangle$, noté $|\phi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$,

est le vecteur

$$|\psi\rangle = |\phi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle = \sum_{ij} a_i b_j |u_i(1)\rangle |v_j(2)\rangle \quad (5.1)$$

et on peut écrire

$$\left[\langle u_i(1) | \otimes \langle v_l(2) | \right] \left[|u_j(1)\rangle \otimes |v_m(2)\rangle \right] = \langle u_i(1) | u_j(1) \rangle \langle v_l(2) | v_m(2) \rangle = \delta_{ij} \delta_{lm}$$

4. Vecteur de $\mathcal{E}$

Soit $\{|u_i(1)\rangle |v_l(2)\rangle\}$ une base orthonormée complète dans $\mathcal{E}$ et soit $|\psi\rangle$ un ket appartenant à cet espace.

$$\bullet\bullet |\psi\rangle = \sum a_i b_l |u_i(1)\rangle |v_l(2)\rangle$$

$\bullet\bullet a_i b_l$ sont les coordonnées de $|\psi\rangle$ dans la base $\{|u_i(1)\rangle |v_l(2)\rangle\}$ avec $|\phi(1)\rangle = \sum_i a_i |u_i(1)\rangle$ et $|\chi(2)\rangle = \sum_i b_i |v_i(2)\rangle$.

5. Produit scalaire dans $\mathcal{E}$

L'existence du produit scalaire (PS) dans $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ permet de définir un PS dans $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$.

Le produit scalaire de $|\phi(1)\rangle |\chi(2)\rangle$ par $|\phi'(1)\rangle |\chi'(2)\rangle$ est défini par la quantité

$$\langle \phi'(1) | \langle \chi'(2) | \phi(1) \rangle | \chi(2) \rangle = \langle \phi'(1) | \phi(1) \rangle \langle \chi'(2) | \chi(2) \rangle$$

Toutes les propriétés du produit scalaire sont toujours valables dans l'espace $\mathcal{E}$.

6. Produit tensoriel de deux opérateurs $A(1)$ et $B(2)$: $A(1) \otimes B(2)$

Soient $A(1)$ et $B(2)$ deux opérateurs linéaires agissant respectivement dans $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$.

Le produit tensoriel $A(1) \otimes B(2)$ est l'opérateur linéaire de $\mathcal{E}$ défini par

$$\begin{aligned} (A(1) \otimes B(2)) (|\phi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle) &= \\ (A(1)B(2)) (|\phi(1)\rangle |\chi(2)\rangle) &= (A(1)B(2)) (|\phi(1), \chi(2)\rangle) \\ (A(1)|\phi(1)\rangle) (B(2)|\chi(2)\rangle) &= (B(2)|\chi(2)\rangle) (A(1)|\phi(1)\rangle) \end{aligned} \quad (5.2)$$

On remarque d'après ce qui précède que $A(1)B(2) = B(2)A(1)$ ou encore $[A(1), B(2)] = 0$.

Dans la suite, la notation $\otimes$ représentant le symbole du produit tensoriel sera souvent omise des formules sauf s'il y a une ambiguïté. Ses éléments de matrices dans la base $\{|u_i(1)\rangle|v_l(2)\rangle = |u_i(1), v_l(2)\rangle\}$ sont

$$\begin{aligned} \langle u_i(1), v_l(2) | A(1)B(2) | u_j(1), v_m(2) \rangle &= \\ \langle u_i(1) | A(1) | u_j(1) \rangle &= \langle v_l(2) | B(2) | v_m(2) \rangle \\ &= A_{ij}(1)B_{lm}(2) \end{aligned} \quad (5.3)$$

• **Cas particuliers : $A(1) = I(1)$ et $B(2) = I(2)$**

•• Si $A(1) = I(1)$ est l'opérateur identité de $\mathcal{E}_1$, alors

$$(I(1)B(2))|\phi(1), \chi(2)\rangle = |\phi(1)\rangle(B(2)|\chi(2)\rangle) \quad (5.4)$$

et

$$\langle u_i(1), v_l(2) | I(1)B(2) | u_j(1), v_m(2) \rangle = \delta_{ij}(1)B_{lm}(2) \quad (5.5)$$

•• Si $B(2) = I(2)$ est l'opérateur identité de $\mathcal{E}_2$, alors

$$(A(1)I(2))(|\phi(1), \chi(2)\rangle) = (A(1)|\phi(1)\rangle)|\chi(2)\rangle \quad (5.6)$$

et

$$\langle u_i(1), v_l(2) | A(1)I(2) | u_j(1), v_m(2) \rangle = A_{ij}(1)\delta_{lm}(2) \quad (5.7)$$

7. Valeurs et vecteurs propres

• Si $|\phi(1)\rangle$ est vecteur propre de A avec la valeur propre a ($A|\phi(1)\rangle = a|\phi(1)\rangle$), alors $|\phi(1), \chi(2)\rangle$ est vecteur propre de $A \otimes I(2)$ avec la valeur propre a

$$(A \otimes I(2))|\phi(1), \chi(2)\rangle = A|\phi(1), \chi(2)\rangle = a|\phi(1), \chi(2)\rangle \quad (5.8)$$

• Si $|\chi(2)\rangle$ est vecteur propre de B avec la valeur propre b ($B|\chi(2)\rangle = b|\chi(2)\rangle$), alors $|\phi(1), \chi(2)\rangle$ est vecteur propre de $I(1) \otimes B$ avec la valeur

propre b

$$\left(I(1) \otimes B \right) \left| \phi(1), \chi(2) \right\rangle = B \left| \phi(1), \chi(2) \right\rangle = b \left| \phi(1), \chi(2) \right\rangle \quad (5.9)$$

Les opérateurs identité $I(1)$ et $I(2)$ sont souvent omises des expressions.

8. Remarques :

- Si A (B) est une observable dans $\mathcal{E}_1$ ($\mathcal{E}_2$), alors il est aussi observable dans $\mathcal{E}$.
- Le spectre de A (B) est le même dans $\mathcal{E}_1$ ($\mathcal{E}_2$) que dans $\mathcal{E}$.
- Toutefois si une valeur propre est dégénérée g_n fois dans $\mathcal{E}_1$ ($\mathcal{E}_2$), alors elle est dégénérée $g_n \times \dim \mathcal{E}_2$ ($g_n \times \dim \mathcal{E}_1$) fois dans $\mathcal{E}$.

5.3 système de deux spins 1/2

Les espaces des états, $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$, des deux spins 1/2 sont des espaces à deux dimensions $(2s + 1) = 2 \times 1/2 + 1 = 2$. L'espace des états du système formé par les deux spins, $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$, est à quatre dimensions (2×2) . Les états propres des opérateurs S_{1z} et S_{2z} , $\left| \epsilon_1 \right\rangle$ et $\left| \epsilon_2 \right\rangle$ avec $\epsilon_i = \pm 1$, sont choisis comme base orthonormée de $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$.

Chapitre 6

Composition de moments cinétiques

6.1 Problématique

Une fois qu'un système contient deux moments cinétiques ($\vec{L}$ et $\vec{S}$ par exemple) ou un système à deux particules (ou plus), des termes, qu'on appelle couplage, de type $\vec{L}.\vec{S}$, $\vec{S}.\vec{S}$ ou de façon générale de type $\vec{J}.\vec{J}$ apparaissent dans l'Hamiltonien de ce système. On s'appérçoit facilement que ce type de couplage ne commute pas avec L_z ou S_z ou de de façon générale avec J_z et donc ne commute pas avec l'Hamiltonien. La présence de ce type de terme mis en cause la base de vecteurs propres communs entre H J^2 et J_z et nous ramène à chercher une nouvelle base de vecteurs propres.

Prenant le cas d'un terme de couplage de type $W = K\vec{L}.\vec{S}$. Calculons $[L_z, \vec{L}.\vec{S}] = [L_z, L_x S_x] + [L_z, L_y S_y] + [L_z, L_z S_z]$

$$[L_z, L_x S_x] = L_z L_x S_x - L_z S_x L_x = L_z L_x S_x - L_z L_x S_x = [L_z, L_x] S_x = i\hbar L_y S_x \quad (6.1)$$

de manière analogue

$$[L_z, L_y S_y] = L_z L_y S_y - L_z S_y L_y = L_z L_y S_y - L_z L_y S_y = [L_z, L_y] S_y = -i\hbar L_x S_y \quad (6.2)$$

et, puisque L_z commute avec lui même et avec S_z ,

$$[L_z, L_z S_z] = 0 \quad (6.3)$$

enfin

$$[L_z, W] = i\hbar K (L_y S_x - L_x S_y) \neq 0 \quad \text{en général} \quad (6.4)$$

De la même façon, on trouve

$$[S_z, L_x S_x] = i\hbar L_x S_y \quad (6.5)$$

$$[S_z, L_y S_y] = -i\hbar L_y S_x \quad (6.6)$$

$$[S_z, L_z S_z] = 0 \quad (6.7)$$

$$[S_z, W] = i\hbar K (L_x S_y - L_y S_x) \quad (6.8)$$

qui n'est pas nul non plus en général.

Par contre, et en remarquant que $[L_z, W] = -[S_z, W]$, le commutateur $[L_z + S_z, W] = 0$. De façon générale, l'observable $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ commute avec W donc avec H . On peut montrer que $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ commute aussi avec W donc avec l'Hamiltonien H .

Pour conclure, un système qui possède un terme de couplage comme celui du type (W) , le problème revient à remplacer l'ensemble des observables H, L^2, L_z, S^2 et S_z qui ne commutent pas deux à deux par l'ensemble d'observables, $H + W, L^2, S^2, J^2$ et J_z , qui commutent deux à deux.

Pour chercher les vecteurs propres communs à $H + W, L^2, S^2, J^2$ et J_z , on commence par traiter un cas simple afin de se familiariser avec la méthodologies et la problématique puis traiter un cas général tel le couplage spin-orbite.

6.2 Composition de deux spins 1/2

Dans cette section, on considère seulement les degrés de liberté interne ($H = 0$) de deux électrons (ou de deux atomes d'argent). L'un de ces électrons est représenté par les observables S_1^2 et S_{1z} ayant les nombres quantiques $l_1 = 1/2$ et $m_1 = \pm 1/2$ et d'espace des états $\mathcal{E}_1$. L'autre électron est représenté par les observables S_2^2 et S_{2z} ayant les nombres quantiques $l_2 = 1/2$ et $m_2 = \pm 1/2$ et d'espace des états $\mathcal{E}_2$. Le système formé par les deux électrons est représenté par les observables S_1^2, S_{1z}, S_2^2 et S_{2z} et l'espace des états est produit tensoriel de $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$. Les espaces des états $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ sont des espaces à deux dimensions. L'espace des états du système formé par les deux spins, produit tensoriel des deux autres c.à.d. $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$, est à quatre dimensions. Si ces deux électrons n'interagissent pas, leurs

observables commutent deux à deux et par conséquent ont quatre vecteurs propres communs¹ $\{|m_1, m_2\rangle : | +1/2, +1/2\rangle, | +1/2, -1/2\rangle, | -1/2, +1/2\rangle, | -1/2, -1/2\rangle\}$.

Par contre en présence d'interaction du type $W = K\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$, les vecteurs $|m_1, m_2\rangle$ ne sont plus vecteurs propres de W , S_1^2 , S_{1z} , S_2^2 et S_{2z} puisque S_{1z} et S_{2z} ne commutent pas avec W . Par contre, en considérant la composition de S_1 et S_2 et en prenant $\vec{J} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$, les observables W , S_1^2 , S_2^2 , J^2 et J_z commutent deux à deux et par conséquent nous allons nous intéresser à leurs valeurs et vecteurs propres communs. Pour cela, remarquons que

$$J^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = S_1^2 + S_2^2 + \frac{2}{K}W \quad (6.9)$$

$$\implies W = \frac{K}{2}(J^2 - S_1^2 - S_2^2) \quad (6.10)$$

Ce qui montre que l'interaction W est combinaison linéaire des autres observables. Le problème revient donc à chercher les valeurs et vecteurs propres de S_1^2 , S_2^2 , J^2 et J_z en terme de ceux de S_1^2 , S_{1z} , S_2^2 et S_{2z} .

6.2.1 Rappels et notations

On rappelle que $\vec{J}$ a un comportement de moment cinétique (voir travaux dirigés) c.à.d.

$$J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \quad (6.11)$$

$$J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \quad (6.12)$$

$$J_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle \quad (6.13)$$

1. Le nombre quantique l ne sera plus mentionné car sa valeur est fixe et les vecteurs propres seront notés $|m_1, m_2\rangle$ au lieu de $|l_1, m_1, l_2, m_2\rangle = |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$

Exemple :

$$J_z |1, 1\rangle = \hbar |1, 1\rangle \quad (6.14)$$

$$J^2 |1, 1\rangle = 2\hbar^2 |1, 1\rangle \quad (6.15)$$

$$J_+ |1, 1\rangle = 0 \times \hbar |1, 2\rangle = 0 \quad (6.16)$$

$$J_- |1, 1\rangle = \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle. \quad (6.17)$$

En plus par souci de simplification et pour alléger les écritures de la base de S_1^2 , S_{1z} , S_2^2 et S_{2z} , on pose

$$|+1/2, +1/2\rangle = |+, +\rangle \quad (6.18)$$

$$|+1/2, -1/2\rangle = |+, -\rangle \quad (6.19)$$

$$|-1/2, +1/2\rangle = |-, +\rangle \quad (6.20)$$

$$|-1/2, -1/2\rangle = |-, -\rangle \quad (6.21)$$

et sachant que $J_z = S_{1z} + S_{2z}$, on a

$$\begin{cases} J_z |+, +\rangle = S_{1z} |+, +\rangle + S_{2z} |+, +\rangle = \frac{\hbar}{2} |+, +\rangle + \frac{\hbar}{2} |+, +\rangle = \hbar |+, +\rangle \\ J_z |+, -\rangle = S_{1z} |+, -\rangle + S_{2z} |+, -\rangle = \frac{\hbar}{2} |+, -\rangle - \frac{\hbar}{2} |+, -\rangle = 0 \times \hbar |+, -\rangle \\ J_z |-, +\rangle = S_{1z} |-, +\rangle + S_{2z} |-, +\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-, +\rangle + \frac{\hbar}{2} |-, +\rangle = 0 \times \hbar |-, +\rangle \\ J_z |-, -\rangle = S_{1z} |-, -\rangle + S_{2z} |-, -\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-, -\rangle - \frac{\hbar}{2} |-, -\rangle = -\hbar |-, -\rangle \end{cases} \quad (6.22)$$

6.2.2 Valeurs et vecteurs propres de S_1^2 , S_2^2 , J^2 et J_z

On voit d'après ce qui précède que le ket $|+, +\rangle$ est ket propre de J_z . Et puisque $\vec{J}$ a un comportement de moment cinétique, son action sur le ket $|1, 1\rangle$ (de moment cinétique $J = 1$) montre que les deux kets propres de J_z sont équivalents puisqu'ils ont la même valeur propre $\hbar$.

$$J_z |1, 1\rangle \stackrel{(6.27)}{=} \hbar |1, 1\rangle \implies |1, 1\rangle = |+, +\rangle \quad (6.23)$$

et on vérifie bien que $J_+|1, 1\rangle \stackrel{(6.16)}{=} 0$. En effet,

$$J_+|1, 1\rangle = (S_{1+} + S_{2+})|+, +\rangle = S_{1+}|+, +\rangle + S_{2+}|+, +\rangle = 0 + 0 = 0 \quad (6.24)$$

De plus l'action de J_- sur $|1, 1\rangle$ nous donne le ket $|1, 0\rangle$ en terme de la base $\{|\pm, \pm\rangle\}$. En effet

$$\begin{aligned} J_-|1, 1\rangle &= (S_{1-} + S_{2-})|+, +\rangle = S_{1-}|+, +\rangle + S_{2-}|+, +\rangle \\ &= \hbar|-, +\rangle + \hbar|+, -\rangle = \hbar(|-, +\rangle + |+, -\rangle) \end{aligned} \quad (6.25)$$

de l'autre côté d'après l'équation (6.17)

$$\begin{aligned} J_-|1, 1\rangle &= \sqrt{2}|1, 0\rangle \\ \Rightarrow |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|-, +\rangle + |+, -\rangle) \end{aligned} \quad (6.26)$$

et on peut vérifier également que $J_z|1, 0\rangle \stackrel{(6.11)}{=} 0 \times \hbar|1, 0\rangle = 0$. En effet

$$J_z|1, 0\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}(S_{1z} + S_{2z})(|-, +\rangle + |+, -\rangle) = 0 \quad (6.27)$$

Enfin on a

$$J_-|1, 0\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}(S_{1-} + S_{2-})(|-, +\rangle + |+, -\rangle) = \hbar\sqrt{2}|-, -\rangle \quad (6.28)$$

en plus, d'après l'équation (6.13)

$$\begin{aligned} J_-|1, 0\rangle &= \hbar\sqrt{2}|1, -1\rangle \\ \Rightarrow |1, -1\rangle &= |-, -\rangle \end{aligned} \quad (6.29)$$

et

$$J_z|1, -1\rangle \stackrel{(6.11)}{=} -\hbar|1, -1\rangle \quad \text{et} \quad J_-|1, -1\rangle \stackrel{(6.13)}{=} 0 \quad (6.30)$$

Ce qui montre que l'ensemble des vecteurs $\{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$ forme une base de vecteurs propres communs d'un moment angulaire $J = 1$ et peuvent s'écrire en terme de la base de vecteurs propres communs à la composition de deux spins sans interaction. Dans notre cas, les deux spins interagissent et l'espace produit tensoriel résultant est à quatre dimension. Ainsi Il faut chercher le quatrième vecteur propre pour former la base produit tensoriel $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$.

On remarque que la valeur propre 0 de J_z (voir Eqts. (6.22)) est dégénérée deux fois c.à.d. lui correspond deux vecteurs propres. L'un de ces vecteurs propres est $|1, 0\rangle$ (voir Eqts. (6.11) et (6.27)). L'autre ne peut être que (voir travaux dirigés)

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle) \quad (6.31)$$

et on peut vérifier que

$$J_z|0, 0\rangle = 0 \quad \text{et} \quad J_{\pm}|0, 0\rangle = 0 \quad (6.32)$$

qui correspond à un moment angulaire zéro ($J = 0$). Ces quatre vecteurs forment une base orthonormée de $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ et l'ensemble d'observables compatible $\{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{J}^2, J_z\}$ est complet (E.C.O.C.). On appelle les états $J = 1$ les états triplet et l'état $J = 0$ état singulet.

6.3 Cas général : Composition de deux moments angulaires $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$

Pour généraliser la composition à deux moments angulaires quelconques, on considère la composition

- d'un premier moment angulaire $\vec{J}_1$ agissant sur l'espace des états $\mathcal{E}_{j_1}$ de dimension $(2j_1 + 1)$ (car $-j_1 \leq m_1 \leq j_1$) et de base propre commune $|j_1, m_1\rangle$ aux observables J_1^2 et J_{1z} .
- d'un deuxième moment angulaire $\vec{J}_2$ agissant sur l'espace des états $\mathcal{E}_{j_2}$ de dimension $(2j_2 + 1)$ (car $-j_2 \leq m_2 \leq j_2$) et de base propre commune $|j_2, m_2\rangle$ aux observables J_2^2 et J_{2z} .

• leur moment angulaire composé $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ agissant sur l'espace des états $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{j_1} \otimes \mathcal{E}_{j_2}$ de dimension $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ et de base propre commune $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ aux observables J_1^2, J_2^2, J_{1z} et J_{2z} telle que

$$J_1^2 |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \quad (6.33)$$

$$J_2^2 |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \quad (6.34)$$

$$J_{1z} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = m_1\hbar |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \quad (6.35)$$

$$J_{2z} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = m_2\hbar |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \quad (6.36)$$

$$(6.37)$$

Cependant $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ ne sont pas généralement des constantes du mouvement c.à.d. $[H, \vec{J}_1] \neq 0$ et $[H, \vec{J}_2] \neq 0$ alors que J^2 et J_z le sont c.à.d. $[H, J^2] = 0$ et $[H, J_z] = 0$.

Le but est donc de construire une nouvelle base formée de vecteurs propres communs à J^2 et J_z à partir de celle de J_1^2, J_2^2, J_{1z} et J_{2z} .

L'intérêt de cette nouvelle base est important une fois on cherche à déterminer les états propres du système (état propre de H) dans laquelle la diagonalisation de la matrice représentant H devient simple. En effet, comme $[H, J^2] = 0$ et $[H, J_z] = 0$, cette se décompose en autant de blocs qu'il y a de sous espaces propres associés aux divers ensembles de valeurs propres de J^2 et J_z . Sa structure (diagonale en blocs) est beaucoup plus simple que celle de la matrice représentant H dans la base des vecteurs propres communs à J_1^2, J_2^2, J_{1z} et J_{2z} puisque ni J_{1z} ni J_{2z} ne commutent en général avec H .

6.3.1 Les deux bases standards possibles

Base des vecteurs propres communs à J_1^2, J_2^2, J_{1z} et J_{2z}

On la note

$$\{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\} \equiv \{|j_1, m_1\rangle\} \otimes \{|j_2, m_2\rangle\} \equiv \{|m_1, m_2\rangle\} \quad \text{à } j_1 \text{ et } j_2 \text{ fixés} \quad (6.38)$$

vérifiant les relation (6.33), (6.34), (6.35) et (6.36).

Base des vecteurs propres communs à J_1^2 , J_2^2 , J^2 et J_z

On la note

$$\left\{ \left| j_1, j_2, J, M \right\rangle \right\} \equiv \left\{ \left| J, M \right\rangle \right\} \quad \text{à } j_1 \text{ et } j_2 \text{ fixés} \quad (6.39)$$

vérifiant (6.33), (6.34) ainsi que

$$J^2 \left| J, M \right\rangle = J(J+1)\hbar^2 \left| J, M \right\rangle \quad (6.40)$$

$$J_z \left| J, M \right\rangle = M\hbar \left| J, M \right\rangle \quad (6.41)$$

$$(6.42)$$

avec $|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$ et $-J \leq M \leq J$ par saut d'une unité c.à.d. il y a $(2J+1)$ valeurs.

6.3.2 Passage d'une base à l'autre

En insérant la relation de fermeture

$$\left| J, M \right\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{+j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{+j_2} \left| m_1, m_2 \right\rangle \underbrace{\left\langle m_1, m_2 \left| J, M \right\rangle\right\}}_{\text{coefficients de Clebsch-Gordon}} \quad (6.43)$$

inversement

$$\left| m_1, m_2 \right\rangle = \sum_{J=j_1-j_2}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^{+J} \left| J, M \right\rangle \underbrace{\left\langle J, M \left| m_1, m_2 \right\rangle\right\}}_{\text{coefficients de Clebsch-Gordon}} \quad (6.44)$$

Bibliographie

- [1] Physique quantique, édition CNRS **Michel Le-Bellac**.
- [2] Mécanique quantique I et II, édition Hermann **Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloe**.
- [3] <https://cours.espci.fr/site.php?id=201&fileid=724>.
- [4] Quantum Mechanics : An introduction, **W. Greiner**, Third Edition 1994, Springer-Verlag.
- [5] Mécanique Quantique, Tome 1, **C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe**, Hermann 1977.
- [6] Mécanique Quantique 1 : Notes de Cours, **R. Côté**, Université de Sherbrooke, 2000.
- [7] Notes de cours sur la mécanique quantique, **F. Faure**.
- [8] Mécanique Quantique, **R.P Feynman, R.B. Leighton et M. Sand**.
- [9] Cours de physique, Physique Quantique, Série Berkeley, **E.H. Wichman**.
- [10] <http://www.lpm2c.grenoble-cnrs.fr/people/Faure>.
- [11] <http://economie.u-bourgogne.fr/elearning/ressources-mecaquantique.html>.
- [12] <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hph.html>.