Classe inversée V : Moments cinétiques

1 Relations de commutation

1.1 Définition de l'opérateur de moment cinétique orbital

Par analogie avec les variables cinématiques classiques, on définit l'opérateur quantique de moment cinétique orbital

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}.$$

Calculez explicitement les trois composantes vectorielles de ce vecteur d'opérateur.

1.2 Relations constitutives

Démontrez pour le moment cinétique orbital la relation

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

ainsi que les relations obtenues par permutation circulaire.

Définition : D'une manière générale, si $\mathbf{J}$ est un vecteur composé de trois opérateurs hermitiens J_x, J_y, J_z, cet opérateur sera appelé un moment cinétique si et seulement si

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \tag{1}$$

et permutations circulaires. Un moment cinétique *orbital* est habituellement noté $\mathbf{L}$, le moment cinétique *de spin* est habituellement noté $\mathbf{S}$.

1.3 Commutation de L avec H

Considérons l'hamiltonien $H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R})$. Calculez $[L_i, H]$ avec $i = x, y$ ou z.

Supposons maintenant que V est isotrope, donc $V(\mathbf{r}) = V(r)$. Montrez que dans ce cas L_i commute avec H (et sera donc une quantité conservée).

1.4 Commutation avec $\mathbf{J}^2$

On définit $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$, opérateur qui peut s'interpréter comme la norme au carré du moment cinétique. Montrez que cet opérateur commute avec chaque composante du moment cinétique :

$$\left[\mathbf{J}, \mathbf{J}^2\right] = \mathbf{0}$$

1.5 Codiagonalisation

Supposons que V est isotrope. Justifiez qu'il existe une base de diagonalisation commune à H, $\mathbf{L}^2$ et une des trois projections de $\mathbf{L}$ (par exemple L_z). Justifiez que dans cette base ni L_x ni L_y ne peuvent être diagonaux.

1.6 Base propre commune

On suppose dorénavant que H, J_z et J^2 commutent tous trois entre eux. Soit $|\psi\rangle$ un élément de la base de codiagonalisation (base qui peut être coisie orthonormée)). Justifiez qu'on peut écrire en toute généralité:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle,$$

$$J_z|\psi\rangle = \hbar m|\psi\rangle \quad (m \in \mathbb{R})$$
$$J^2|\psi\rangle = \hbar^2 j(j+1)|\psi\rangle \quad (j \geq 0)$$

1.7 Valeurs et vecteurs propres

Donnez un sens physique à E, m et j. On notera dorénavant ce vecteur propre $|\psi\rangle = |\psi_{j,m}\rangle = |j,m\rangle$. Que vaut $\langle j', m'|j, m\rangle$?

2 Opérateurs d'échelle

On définit les deux opérateurs

$$J_\pm = J_x \pm iJ_y. \tag{2}$$

2.1 Relations mathématiques utiles

Démontrez les relations suivantes (dans cet ordre, c'est plus facile) :

$$[J_z, J_\pm] = \pm\,\hbar J_\pm$$
$$[H, J_\pm] = 0$$
$$\left[J^2, J_\pm\right] = 0$$
$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$$
$$J_+\,J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$$
$$J_-\,J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$$
$$J^2 = J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+\,J_- + J_-\,J_+).$$

2.2 Action de $J_\pm$ sur la base des $\{|j,m\rangle\}$

Montrez que $J_+|j,m\rangle$ est aussi un vecteur propre de J_z, de valeur propre que l'on déterminera.

Invoquez la relation $\left[J^2, J_\pm\right] = 0$ pour justifier que $J_+|j,m\rangle \propto |j,m+1\rangle$.

Et que dire de $J_-|j,m\rangle$?

2.3 Norme de $J_\pm|j,m\rangle$

Calculez la norme carrée des vecteurs $J_+|j,m\rangle$ et $J_-|j,m\rangle$ et déduisez-en le facteur de proportionnalité de la question précédente.

2.4 Contraintes sur les valeurs relatives de m et j

Ecrivez que les deux normes carrés calculées ci-dessus doivent être positives, pour en déduire

$$-j \leq m \leq j.$$

2.5 Ensemble des valeurs possibles de m et j

Considérons m_{max}, la plus grande valeur positive des $m \leq j$. Considérez les deux possibilités, $m_{max} = j$ et $m_{max} < j$. Montrez que la deuxième hypothèse conduit à une absurdité qui est évitée par la première. Concluez sur les ensembles de valeurs possibles que peuvent prendre les j, ainsi que les m pour un j donné.

3 Un exemple fondamental : le moment cinétique de spin $1/2$

3.1 Ecriture matricielle

Considérons le plus petit système de moment cinétique non-trivial : $j = 1/2$. Il s'ensuit que $m = \pm 1/2$. Par économie d'écriture, on notera les deux vecteurs propres $|j = 1/2, m = \pm 1/2\rangle = |\pm\rangle$.

Soit $\mathbf{S}$ l'opérateur moment cinétique associé à ces valeurs propres. Ecrivez les opérateurs S_z et $\mathbf{S}^2$ sous forme matricielle dans cette base.

3.2 Matrice $S_\pm$

Trouvez l'expression matricielle de $S_\pm$.

3.3 Matrices de Pauli

En inversant les relations qui définissent les opérateurs d'échelle, déterminez S_x et S_y. Montrez que l'on peut écrire in fine

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\sigma,$$

où le vecteur d'opérateurs σ est constitué de trois matrices

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

appelées *matrices de Pauli*.

Solutions

Ainsi on a par exemple

$$L_x = Y\,P_z - Z\,P_y = -i\hbar\left(Y\,\frac{\partial}{\partial z} - Z\,\frac{\partial}{\partial y}\right).$$

$$\begin{aligned}
[L_x, L_y] &= [(Y P_z - Z P_y), (Z P_x - X P_z)] \\
&= Y\,[P_z, Z]\,P_x + P_y\,[Z, P_z]\,X \\
&= i\hbar(-Y\,P_x + X\,P_y) = i\hbar L_z
\end{aligned}$$

Calculons

$$\begin{aligned}
[L_x, H] &= \left[(Y\,P_z - Z\,P_y), \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R})\right)\right] \\
&= (P_z\left[Y, P_y^2\right] - P_y\left[Z, P_z^2\right])/2m + Y\,[P_z, V] - Z\,[P_y, V] \\
&= (P_z 2i\hbar P_y - P_y 2i\hbar P_z)/2m - i\hbar\left[Y\frac{\partial V}{\partial z} - Z\frac{\partial V}{\partial y}\right]
\end{aligned}$$

En effet $[P_z, V]\,\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}(V\psi) - V(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial z}\psi = -i\hbar\left(\frac{\partial V}{\partial z}\right)\,\psi$.
D'où enfin

$$[L_x, H] = i\hbar\left[Y\frac{\partial V}{\partial z} - Z\frac{\partial V}{\partial y}\right].$$

Si le potentiel est isotrope, c'est à dire $V(x, y, z) = V(r)$ avec $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, alors

$$\frac{\partial V}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z}\,\frac{dV}{dr} = \frac{z}{r}\,V'(r)$$

On voit que dans ce cas, $[L_x, H] = 0$. On admettra que la réciproque est vraie, d'où

$$[\mathbf{L}, H] = \mathbf{0} \iff V(x, y, z) = V(r).$$

$$\begin{aligned}
\left[J_x, \mathbf{J}^2\right] &= \left[J_x, J_y^2 + J_z^2\right] = J_x\,J_y^2 - J_y^2\,J_x + J_x\,J_z^2 - J_z^2\,J_x \\
&= ([J_x, J_y] - J_y\,J_x)J_y - J_y([J_y, J_x] - J_x\,J_y)
\end{aligned}$$

$$+([J_x, J_z] - J_z\,J_x)J_z - J_z([J_z, J_x] - J_x\,J_z)$$
$$= i\hbar([J_z, J_y] + [J_y, J_z]) = 0$$

Par ailleurs, si chacune des composantes de $\mathbf{J}$ commute avec H, alors de manière évidente

$$\left[\mathbf{J}^2, H\right] = 0.$$

Si H, $\mathbf{L}^2$ et L_z commutent tous les trois, ils sont codiagonalisables. L_x a beau commuter aussi avec H, $\mathbf{L}^2$ (et donc être codiagonalisable avec eux deux), il ne commute pas avec L_z, donc ces deux quantités ne peuvent pas être simultanément conservées.

L'énergie E dans l'équantion $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, est souvent la solution finale recherchée. La valeur propre $\hbar m$ de J_z a la bonne dimension si m est un nombre sans dimensions. De même, le choix de la notation $\hbar^2 j(j+1)$ implique que j est un nombre sans dimensions. Comme la fonction $x(x+1)$ réalise une bijection entre $\mathbb{R}_+$ et $\mathbb{R}_+$, et que l'on sait que la valeur propre de $\mathbf{J}^2$ doit être positive, cette notation de la valeur propre via le paramètre j est licite et sans ambiguïté. Son intérêt deviendra clair par la suite.

E est bien sûr l'énergie.

$j \approx \sqrt{j(j+1)}$ doit être vu comme la norme du moment cinétique. La différence entre les deux tend vers $1/2$ pour j grand.

$\hbar m$ est la projection du moment cinétique sur l'axe Oz.

La base propre étant orthonormée, on a $\langle j', m'|j, m\rangle = \delta_{m,m'}\,\delta_{j,j'}$.

Opérateurs d'échelle

Pour comprendre l'action de $J_\pm$ sur $|j, m\rangle$, calculons

$$J_z\,J_+|j, m\rangle = ([J_z, J_+] + J_+ J_z)\,|j, m\rangle$$
$$= \hbar(m+1)\,J_+|j, m\rangle.$$

Le vecteur $J_+|j, m\rangle$ est donc lui aussi un vecteur propre de J_z, de valeur propre $m+1$. Donc on peut l'écrire

$$J_+|j, m\rangle = \alpha|j', m+1\rangle$$

où α est un coefficient de proportionnalité qui peut être complexe et j' peut a priori être différent de j.

Pour justifier qu'en fait $j' = j$, notons que

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

Donc $J_+|j,m\rangle$ est aussi un vecteur propre de J^2, de valeur propre j. De même,

$$H\, J_+|j,m\rangle = J_+\, H\,|j,m\rangle = E\, J_+\,|j,m\rangle.$$

Donc in fine J_+ a seulement mofifié le paramètre m et rien d'autre dans le vecteur de départ.

Le vecteur $J_+|j,m\rangle$ est donc, à une constante de normalisation près, égal à $|j,m+1\rangle$. J_+ transforme donc un vecteur de la base $|j,m\rangle$ et un autre, $|j,m+1\rangle$. De la même manière, on montre que J_- transforme $|j,m\rangle$ en $|j,m-1\rangle$, toujours à une constante de normalisation près.

On peut calculer le préfacteur de normalisation en calculant la norme de $J_+|j,m\rangle$:

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

Par conséquent

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

.

De la même manière, on trouve

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

et donc

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

Les résultats précédents montrent que si $\hbar m$ est valeur propre de J_z alors $\hbar(m+1)$ et $\hbar(m-1)$ l'est aussi. On admettra que les seules valeurs propres possibles sont générées ainsi.

En combinant les deux contraintes sur la positivité des deux normes calculées ci-dessus, on trouve

$$-j \le m \le j.$$

Supposons $j-1 < m_{max} < j-$. Calculons dans ce cas $J_+|j, m_{max}\rangle$. On voit que $\|J_+|j,m\rangle\|^2 < 0$, ce qui ne peut être vrai. Par contre, si $m_{max} = j-$, alors on obtient

$$J_+|j, m_{max} = j\rangle = 0,$$

ce qui évite le problème précédent. De même

$$J_-|j, -j\rangle = 0.$$

Les m forment donc une chaîne de nombres réels, tous espacés d'un nombre entier. Le plus grand d'entre eux est égal à un nombre positif j et le plus petit d'entre eux est égal à $-j$. La distance entre $-j$ et j $(= 2j)$ doit donc être un nombre entier, donc j est soit entier soit demi-entier.

Pour un j donné, les m possibles sont de la forme $m = -j,\ -j+1, ..., j-1,\ j$, donc également soit tous entiers, soit tous demi-entiers.

Spin 1/2

Par définition des valeurs propres j et m, on a dans cette base

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

et

$$\mathbf{S}^2 = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}.$$

En écrivant l'action de $S_\pm$ sur les vecteurs $|\pm\rangle$ respectivement, on trouve

$$S_+ = \hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

et

$$S_- = \hbar\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix}.$$

En inversant les relations de l'Eq. (2), on détermine S_x et S_y, ce qui permet d'écrire in fine

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\sigma,$$