Charge 1

Jean-Baptiste Bertrand

19 janvier 2022

$$H_p \frac{1}{2m} = \left\{ \vec{p} \cdot \underbrace{\left[\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right]}_{\vec{\Pi}} \right\}^2 + qV(\vec{R})$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 = \vec{\pi} \cdot \vec{\pi} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{\pi} \times \pi)$$

<u>Preuve :</u>

$$\boxed{\begin{array}{c} \sigma_i^2 = 1 \\ \sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i \\ \sigma_1 \sigma_2 = i\sigma_3 \end{array}}$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 = \sum_{ij} \sigma_i \pi_i \sigma_j \pi_j = \sum_{ij} + \sum_{i \neq j}$$

... Pas le temps de retranscrire

$$\vec{\pi} \times \vec{\pi} \begin{pmatrix} f_x \\ f_y \\ f_z \end{pmatrix} = \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \times \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \begin{pmatrix} f_x \\ f_y \\ f_z \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{\left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla}(f)}_{0} - \frac{q}{c} \vec{A} \times \frac{\hbar}{i} \boldsymbol{\nabla}(f) - \frac{\hbar}{i} \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \frac{q}{c} \vec{A}(F) + \underbrace{\left(\frac{q}{c} \right)^2 \vec{A} \times A(f)}_{0}$$

Expenssion du produit vectorielle : On se rend compte que sur A ou que sur f

$$= -\frac{\hbar}{i} \frac{q}{c} \underbrace{\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}}_{\mathbf{B}}(f)$$

$$H_p = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + \frac{i\vec{\sigma}}{2m} \cdot \left(-\frac{\hbar}{i}\frac{q}{c}\mathbf{B}\right) + qV(\mathbf{R})$$

Le 2eme terme est genre $S \cdot B$ ou dequoi

$$\boxed{Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}}$$

1 Spineurs et mesures

$$[\psi](\vec{r}) = Ne^{-\alpha r^2/2}\begin{pmatrix}\sin\theta\cos\varphi + \sin\theta\sin\varphi \\ 1 + \cos\theta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r})\end{pmatrix}$$

$$\psi_0(\vec{r}) = f_0(\mathbf{r})\sum_{l,m} Y_l^m(\theta,\varphi)a_{lm\sigma}$$

$$\mathcal{N}([\phi]) = \int \mathrm{d}^3r\left(|\psi_+(\mathbf{r})|^2 + |\psi_-(\mathbf{r})|^2\right) = \int \mathrm{d}r r^2\left(\sum_{lm\sigma} f_0(r)^2|a_{lm\sigma}|^2\right)$$

$$P(l,m,\sigma) = \frac{1}{\mathcal{N}[\psi]} \times \int \mathrm{d}r r^2 f_0(r)^2|a_{lm\sigma}|^2$$

Épisode 0

Jean-Baptiste Bertrand

11 janvier 2022

1 Spin de l'electron : 2 confirmations

Problème de S-f de qqch

La théorie de Bohr n'est pas relativiste. C'est un problème si on considère que les éléctrons vont à $\sim 10^6$ m/s. Si on iclus la relativité, les niveaux d'énériges sont décallés correctement, cependant, la dégénéressance n'est pas levée comme observé expérimentalement.

POur arriver à le faire, on doit considérer l'effet Zeeman.

L'effet Zeeman est la levé des dégénéressance par l'application d'un champ magnétique.

$$-l \leq m \leq l$$

$$2l + 1 \text{ Projections possibles}$$

Il y a toujours un nombre impair de projections.

On suppose que la sep des niv de H est similaire à celle de l'effet Zeeman.

On a donc pensé à l'ajout du nombre quantique du *spin* pour explique cette levé de dégénéressance.

$$|n, l, m\rangle \rightarrow |n, l, m, m_s\rangle$$

Équation de dirac

$$i\hbar\psi = H\psi \ \psi = \psi(\vec{r}, t)$$

Épisode 2

Jean-Baptiste Bertrand

18 janvier 2022

Spineurs, bases et rerésentations

$$\text{ECOC} : X, Y, Z, S_z, (S^2) : \mathcal{E}_{\vec{r}} \otimes \mathcal{E}_s = \mathcal{E} \ \ |\vec{r}, s\rangle \tag{1}$$
$$\text{ECOC} : P_x, P_y, P_z, S_z; |\vec{p}, s\rangle \tag{2}$$
$$\text{ECOC} : H_0, \mathbf{L}^2, L_z, S_z; |n, l, m, s\rangle \tag{3}$$

Relation de fermeture dans $\mathcal{E}$:

$$1 = 1_{\vec{r}} \otimes 1_S = \int \mathrm{d}^3 r \, |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| \otimes \sum_{\epsilon} |\epsilon\rangle \langle \epsilon|$$

$$\implies 1 = \sum_{\epsilon} \int \mathrm{d}^3 r \, |\vec{r}\epsilon\rangle\langle \vec{r}, \epsilon|$$

Preuve très similaire pour les autres bases.

$$|\psi\rangle = 1 \, |\psi\rangle = \sum_{\epsilon} \int \mathrm{d}^3 r \, |\vec{r}, \epsilon\rangle \underbrace{\langle \vec{r}, \epsilon|\psi\rangle}_{\Psi_\epsilon(\vec{r})}$$

Représentation matricielle :

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3 r \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} |\vec{r}\rangle$$

$$\langle \vec{r}|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = [\psi] \ (\mathit{Spineur!})$$

$$\langle \psi| = \int \mathrm{d}^3 r \begin{pmatrix} \psi_+^*(\vec{r}) & \psi_-^*(\vec{r}) \end{pmatrix} \langle \vec{r}|$$

$$|\psi\rangle = 1 \, |\psi\rangle = \sum_{\epsilon} \sum_{n,l,m} |n, l, m, \epsilon\rangle \overbrace{\langle n, l, m, \epsilon|\psi\rangle}^{C_{n,l,m,\epsilon}} \tag{4}$$

si

$$|\vec{r}\rangle\langle n, l, m| = R_n, l(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$\langle \vec{r}|\psi\rangle = \sum_{n,l,m} \sum_{\epsilon} \underbrace{\langle \vec{r}|n, l, m\rangle}_{R_n, l(r) Y_l^m(\theta, \phi)} |\epsilon\rangle \, C_{n,l,m,\epsilon} = \sum_{n,l,m} \begin{pmatrix} c_{n,l,m,+} R_n, l(r) Y_l^m(\theta, \phi) \\ c_{n,l,m,-} R_n, l(r) Y_l^m(\theta, \phi) \end{pmatrix}$$

Norme

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3r[\psi^*][\psi]$$

Produit interieur

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int \mathrm{d}^3r[\psi^*][\phi]$$

Élément de matrice

$$\langle\Psi|\not{\Vdash} A \not{\Vdash}|\Phi\rangle = \sum_{\epsilon,\epsilon'} \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r' \underbrace{\langle\psi|\vec{r}',\epsilon'\rangle}_{\psi^*_\epsilon(\vec{r}')} \underbrace{\langle\vec{r}',\epsilon'|\,A\,|\vec{r},\epsilon\rangle}_{A_{\epsilon'\epsilon}(\vec{r}',\vec{r})} \underbrace{\langle\vec{r}',\epsilon'|\psi\rangle}_{\psi_\epsilon(\vec{r})} = \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'[\psi^*][\![A]\!][\phi]$$

$$L_z \to_{|\vec{r}\rangle} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \to_{\mathcal{E}_{\vec{r}}\otimes\mathcal{E}_\epsilon} = \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial\phi} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial\phi} \end{pmatrix}$$

Mesure
La quatrième postula reste valable :

$$|\psi\rangle : \text{ vecteur d'état}$$

$$\mathcal{P}(\underbrace{a_n}_{\text{val dicrete d'un obs}}) = |\,\langle\varphi_n|\psi\rangle\,|^2$$

$$\mathrm{d}\mathcal{P}(\underbrace{\alpha}_{\text{val continue d'un obs}}) = |\,\langle\omega_\alpha|\psi\rangle\,|^2\mathrm{d}\alpha$$

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

Dans notre cas, qui est une combinaisons de discret et continue, on a :

$$\mathrm{d}\mathcal{P}(\vec{r},\pm) = |\,\langle\vec{r},\pm|\psi\rangle\,|^2\mathrm{d}^3r$$

$$\mathcal{P}_\pm = \int \mathrm{d}\mathcal{P} = \int \mathrm{d}^3r|\psi(\vec{r})|^2$$

Si $[\psi] = \begin{pmatrix} \psi_+(r,\theta,\varphi) \\ \psi_-(r,\theta,\varphi) \end{pmatrix}$

$$\mathcal{P}_{\vec{L}^2} = \left|\int \sum_{l',m'} Y_l^{m*} a_{l',m',+}(r) Y_{l'}^{m'}\mathrm{d}\Omega\right|^2 + \left|\int \sum_{l',m'} Y_l^{m*} a_{l',m',-}(r) Y_{l'}^{m'}\mathrm{d}\Omega\right|^2$$

Épisode 3

Jean-Baptiste Bertrand

19 janvier 2022

Projection sur n,l,m

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}\,|\psi\rangle$$

$$= \sum_{n,l,m,\epsilon} |n,l,m,\epsilon\rangle \underbrace{\langle n,l,m,\epsilon|\psi\rangle}_{c_{n,l,m,\epsilon}}$$

$$\langle\vec{r}|\psi\rangle = \sum_{n,l,m,\epsilon} \underbrace{\langle\vec{r}|n,l,m,\epsilon\rangle}_{R_{n,l}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)} |\epsilon\rangle\, c_{n,l,m,\epsilon}$$

$$= [\psi] = \sum_{n,l,m} \begin{pmatrix} c_{n,l,m,+}R_{n,l}(r)Y_l^m(\theta,\varphi) \\ c_{n,l,m,-}R_{n,l}(r)Y_l^m(\theta,\varphi) \end{pmatrix}$$

$$[\psi] = \sum_{l,m} \begin{pmatrix} a_{n,l,+}(r)Y_l^m(\theta,\varphi) \\ a_{n,l,-}(r)Y_l^m(\theta,\varphi) \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{d}\mathcal{P}_\epsilon(l,m) = ?$$

$$\boxed{\mathbf{L}^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m}$$

$$\boxed{L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m}$$

$$\mathrm{d}\mathcal{P}_\epsilon(l,m) = \left| \int Y_l^{m*} \sum_{l',m'} a_{l',m',\epsilon}(r) Y_{l'}^{m*} \mathrm{d}\Omega \right|^2 r^2 \mathrm{d}r$$

$$\boxed{\int Y_l^{m*} Y_{l'}^{m'} \mathrm{d}\Omega = \delta_{ll'}\delta_{mm'}}$$

$$\mathcal{P}_\epsilon(l,m) = \int r^2 \mathrm{d}r |a_{l,m,\epsilon}(r)|^2$$

$$\mathcal{P}(l,m) = \sum_\epsilon \mathcal{P}_\epsilon(l,m)$$

$$\mathcal{P}(l)\epsilon_{|m|\leq l \mathcal{P}(l,m)} = \sum_{|m|\leq l} \int r^2 \Big(|a_{l,m,+}(r)|^{\,2} + |a_{l,m,-}(r)|^{\,2} \Big) \mathrm{d}r$$

<u>Composition du moment cinétique</u>

Généralisation et mise en contexte

$\vec{P}_i$ n'est pas conservé s'il y a de l'interaction. Ce n'est donc pas un bon nombre quantique.

Si le système satisfait :

$$\sum_i \mathbf{P}_i = \mathbf{P}_T$$

Alors

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{P}_T}{\mathrm{d}t} = 0$$

. Ce qui signigie que $\mathbf{P}_T$ est un bon nombre quantique

$$W_{so} \approx \lambda(L_z S_z + \underbrace{L_x S_x + L_y S_y}_{\frac{1}{2}L_+S_- + \frac{1}{2}L_-S_+})$$

$L_z(m)$ et $S_z(\epsilon)$ ne sont plus des bons nombre quantiques. Le moment cinétique peut être passsé de l'un à l'autre. Cepandant le moment cinétique total, comme toujours, est conservé. On utilise donc le spin total comme nouveau nombre quantique

$$\boxed{\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}}$$

$$\begin{array}{lccc} \text{ECOC :} & \mathbf{L}^2, L_z, S_s & \rightarrow & \mathbf{L}^2, \mathbf{J}^2, J_z \\ & \{|l,m,\epsilon\rangle\} & \rightarrow & \{|l,J,m\rangle\} \end{array}$$

Un exemple simple où cette base pourrait être utilisé est la composition de deux spin.

Épisode 4

Jean-Baptiste Bertrand

28 janvier 2022

Compostition du moment cinétique

Exemple simple : composition de spins $\frac{1}{2}$

$$\text{E.C.O.C : } \mathbf{S}_1^2 \; \mathbf{S}_2^2 \; S_{1z} \; S_{2z}$$

$$\left|\frac{1}{2}, \epsilon_1\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}, \epsilon_2\right\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \epsilon_1, \epsilon_2\right\rangle \to |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle \quad \text{Car les spins sont toujours } 1/2 \text{ dans notre cas}$$

$$\mathbf{S}_1^2 |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\hbar^2 |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle$$
$$\mathbf{S}_{1z} |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \frac{\epsilon}{2}\hbar |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle$$

$$\text{nouvel E.C.O.C : } \mathbf{S}_1^2 \;, \mathbf{S}_2^2 \;, \mathbf{S}^2 \;, S_z$$

On peut vérifier qu'il commutent tous entre eux mais on le feras pas.

On peut également vérifier la complétion. On va le vérifier plus tard.

Cela induit nécessairement une nouvelle base

$$\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, S, M\right\rangle \to |S, M\rangle$$

$$|S, M\rangle = \nVdash |S, M\rangle$$
$$|SM\rangle = \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2} |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\langle\epsilon_1, \epsilon_2| \, |S, M\rangle$$

Les coefficient de cette expression sont appelées Clebsch-Gordan

$$\mathbf{S}^2 |S, M\rangle = S(S+1)\hbar^2 |S, M\rangle$$
$$S_z |S, M\rangle = M\hbar |SM\rangle$$

$$\boxed{S \geq M \geq -S}$$

$$\text{Contrainte } S_z |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = (S_{1z} + S_{2z}) |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \underbrace{\left(\frac{\epsilon_1}{2} + \frac{\epsilon_2}{2}\right)\hbar}_{M\hbar} |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle$$

$$\implies M_{\max} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

$m \backslash S$	1 (triplet)	0 (singulet)
1	$\|1,1\rangle = \|+,+\rangle$	
0	$\|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\|+-\rangle + \|-+\rangle]$	$\|0,0\rangle = \|+,-\rangle - \|-+\rangle$
-1	$\|1,-1\rangle = \|--\rangle$	

Pour savoir comment les nouveau opérateur agissent sur les vecteur, on expirme les nouveaux vecteur et opérateurs en fonctions des anciens

$$\mathbf{S}^2 |1,1\rangle = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 |+,+\rangle = \left(\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2\right) |+,+\rangle = \left(\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2(\underbrace{S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}}_{S_{1+}S_{2+} + S_{1-}S_{2+}} + S_{1z}S_{2z})\right) |+,+\rangle$$

On fait le produit scalaire et on retrouver $S_\pm$

$|0,0\rangle = \alpha |+,-\rangle + \beta |-+\rangle$

On a les contraintes $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ et $\frac{\alpha}{\sqrt{2}} + \frac{\beta}{\sqrt{2}} = 0$ par orthogonalité.

Généralisation à des spins plus grands : spins J_1 et J_2 fixées

L'idée reste la même. On part d'un acien ECOC

$$\text{ECOC} : \mathbf{J}_1^2,\ J_2^2,\ J_{1z},\ J_{2z}$$

Base $|J_1, m_1\rangle \otimes |J_2, m_2\rangle \to |J_1, J_2; m_1, m_2\rangle$

$$\mathbf{J}_1^2 |J_1 J_2 m_1 m_2\rangle = J_1(J_1+1)\hbar^2 |J_1 J_2 m_1 m_2\rangle$$

$$\mathbf{J}_{1z} |J_1 J_2 m_1 m_2\rangle = m_1\hbar |J_1 J_2 m_1 m_2\rangle$$

$$\text{nouvel ECOC } \mathbf{J}_1^2,\ \mathbf{J}_2^2,\ \mathbf{J}^2, J_z$$

$$\boxed{-J \leq M \leq J}$$

On fait le même changement de base avec les coefficients de Clebsch-Gordan. Au lieu d'une somme sur epsilon on doit maintenant sommer sur tout les m_1 et m_2

On trouve, de manière similaire a précédement

$$\boxed{M = m_1 + m_2}$$

Encore une fois, on veut maintenant trouver les nouveau vecteurs prorpes.

$M \backslash J$	$J_1 + J_2$	$J_1 + J_s - 1$
$M_{\max} = J_1 + J_2$	$\|J_1 + J_2, J_1 + J_2\rangle$	
$J_1 + J_2 - 1$	$\|J_1 + J_2, J_1 + J_2 - 1\rangle$	$\|J_1 + J_2 - 1, J_1 + J_2 - 1\rangle$
$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$
$-J_1 - J_2$	$\|-J_1 - J_2, -J_1 - J_2\rangle$	

$$|J_1 + J_2, J_1 + J_2\rangle = |J_1, J_2; J_1, J_2\rangle$$

$$\underbrace{J_-}_{J_{1-}+J_{2-}} \underbrace{|J_1 + J_2, J_1 + J_2\rangle}_{J_1, J_2; J_1, J_2} = \hbar \underbrace{\sqrt{(J_1 + J_2)(J_1 + J_2 + 1) - (J_1 + J_2)(J_1 + J_2 - 1)}}_{2(J_1+J_2)} |J_1, J_2; J_1, J_2\rangle$$

$J_{1-}+J_{2-}$S'applique et donne aussi des longues racines, je suis pas trop sur de la conclusion... On verifié que ça marche je crois

1 Théroème de composition du moment cinétique

Si $\mathbf{j}_1$ et J_2 deux moments cinétiques alors les valeurs propres à J^2 et J_z sibt telles que

$$J = J_1 + J_2, J_1 + J_2 - 1, \cdots, |J_1 - J_2|$$

$$-J \leq M \leq J$$

vecteur propres :

$$|J, M\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |J_1, J_2; M_1, M_2\rangle\langle J_1, J_2; M_1, M_2| \, |J, M\rangle$$

2 Exemple, compostition d'un moment orbitale etd'un spin

$$\mathbf{J}_1 = \mathbf{L}; \quad J_2 = \mathbf{S}$$

$$L^2 \, |l, m_2\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, m_2 \right\rangle = \hbar^2 l(l+1) \, |l, s, m_1, m_2\rangle$$

$$S^2 \, |l, s, m_1, m_2\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \frac{\cdot}{2} \cdots |\rangle$$

$$\cdots$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}; \quad J_\mathrm{z} = L_\mathrm{z} + S_\mathrm{z}$$

$$J = l + \frac{1}{2} \text{ et } J = l - \frac{1}{2}$$

Table 1 – tableau des vecteur propre

$m \backslash J$	$l + \frac{1}{2}$	$l - \frac{1}{2}$	$\cdots$
$l + \frac{1}{2}$	$\lvert l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}\rangle$		$\cdots$
$l - \frac{1}{2}$			$\cdots$

3 Opérateur scalaires et vectoriels (théorème de Wigner-Eckart)

Opérateur scalaire Si A est scalaire $\implies [A, \vec{J}] = 0$

Ex J^2

$$[J^2, \vec{J}] = [J \cdot J, \vec{J}] = \vec{J}[\vec{J}, \vec{J}] + [\vec{J}, \vec{J}]\vec{J} = 0$$

Si A est scalaire $[A, J^2] = \vec{J}[A, \vec{J}] + \vec{J}[\vec{J}, A] = 0$

Opérateur vectoriel

$\vec{V}$ est vectoriel

$$[J_i, V_j] = i\hbar\epsilon_{\text{ijk}} J_i V_j$$

1 Théorème de Wigner-Eckart

$\mathbf{v}$ est vectroiel si $[J_i, v_i] = i\hbar\epsilon_{\mathrm{ijk}}V_k$

$\mathbf{J}$ est vectoriel. Si $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, $\mathbf{S}$, $\mathbf{L}$ le sont aussi

$$[J_i, L_j + S_j] = [J_i, L_i] + [J_i, S_i] = i\hbar\epsilon_{\mathrm{ijk}}(L_k + S_k)$$

$$[J_x, V_x] = 0$$

$$[J_x, v_y] = i\hbar V_z$$
$$[J_x, \underbrace{V_x \pm iV_y}_{V_\pm}] = \mp\hbar V_z$$

$$[J_z, V_z] = 0$$

$$\mathcal{P}_{\mathcal{E}} = \sum_{\mathrm{m}} |k, j, m\rangle\langle k, j, m|$$

$$\mathcal{P}_{\mathcal{E}} V_{\mathrm{z}} \mathcal{P}_{\mathcal{E}} = \alpha P_{\mathcal{E}} J_z P_{\mathcal{E}}$$

$$\langle k, j, m| V_\pm |k', j', m'\rangle = \pm\frac{1}{\hbar} \langle k, j, m| [J_z, V_p m] |k', j', m'\rangle$$

frac12

---

2 Charge

2.1 Composition de 2 spins

$$H_1 \otimes H_1 = H_2 \oplus H_2 \oplus H_0$$

$$|j_1 - j_2| = 0 \leq H \leq j_1 + j_2 = 2$$

$J = 2$

$$|2. + 2\rangle\, |1, +1; 1, +1\rangle$$
$$|2, -2\rangle = |1, -1; 1, -1\rangle$$

M/S	2	1	0
$+2$	$\|2,+2\rangle$		
$+1$	$\|2,+1\rangle$	$\|1,+1\rangle$	
0	$\|2,0\rangle$	$\|1,0\rangle$	$\|0,0\rangle$
$+1$	$\|2,-1\rangle$	$\|1,-1\rangle$	
$+1$	$\|2,-2\rangle$		

TABLE 1 – Tableau de toutes les valeurs possible

$$J_- |2,+2\rangle = \hbar\sqrt{2(2+1)-2(2-1)}\, |2,+1\rangle = (J_{1-}+J_{2-}\, |1,+1,1,+1\rangle) = \hbar\sqrt{1(1+1)-1(1-1)}\, |1,0;1,+1\rangle + \hbar\sqrt{2}\, |1,+1,1,0\rangle$$

$$|2,\pm1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,\pm1,1,0\rangle + |1,0,1,\pm1\rangle)$$

$$J_1 |2,+1\rangle = \hbar\sqrt{2(2+1)-1(1-1)}\, |2,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(J_{1-} + J_{2-}[|1,+1,1,0\rangle + |1,0;1,+1\rangle])$$

$$= \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\Big[\sqrt{2}\, |1,0,1,0\rangle + \sqrt{2}\, |1,1,1,-1\rangle + \sqrt{2}\, |1,0,1,0\rangle + \sqrt{2}\, |1,1,1,-1\rangle\Big]$$

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

On a fini la première colone !

$$|1,+1\rangle = \alpha\, |1,+1,1,0\rangle + \beta\, |1,-;1,+1\rangle$$

$$J_+ |1,+1\rangle = 0 = \hbar\sqrt{2}\alpha\, |1,+1,1,0\rangle + \hbar\sqrt{2}\, |1,0,1,+1\rangle$$

$$\implies \alpha = -\beta$$

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

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

$$J_- |1,+1\rangle = \cdots \implies |1,0\rangle\, \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,+1;1,-1\rangle - |1.-1;1,+1\rangle)$$

$$|0,0\rangle = \alpha\, |1,0,1,0\rangle + \beta\, |1,+1,1,-1\rangle + \gamma\, |1,-1,1,+1\rangle$$

$$0 = J_- |0,0\rangle = \hbar\alpha\sqrt{2} + \cdots \implies \alpha+\beta+\alpha+\gamma = 0$$

$$\implies |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}[|1010\rangle - |11;1-1\rangle - |1,-1,1,+1\rangle]$$

(On a utlisé la normalisation comme 3eme équation)

‘Opérateur vectoriles

$\vec{v}$ est vectoriel si $[v_{,\mathrm{i}}, V_j] = i\hbar\epsilon_{\mathrm{ijk}}$

sous-espace : $\mathcal{E}(k,j) = \{|k,j,m\rangle\,, m = -j, \cdots, j\}$

$$P_{\mathcal{E}} = \sum_{-j}^{j} |k,j,m\rangle\langle k,j,m|$$

$$\boxed{P_{\mathcal{E}}\vec{v}P_{\mathcal{E}} = \alpha P_{\mathcal{E}}\vec{J}P_{\mathcal{E}}}$$

On considère $P_{\mathcal{E}}^2\vec{J}\cdot\vec{v}$

$$= P_{\mathcal{E}}\vec{J}P_{\mathcal{E}}\vec{v}P_{\mathcal{E}} = \alpha P_{\mathcal{E}}\vec{J}\cdot\vec{J}P_{\mathcal{E}} \equiv \alpha$$

$$\Longrightarrow <\vec{J}\cdot\vec{v}>_{\mathcal{E}(k,j)} = \alpha j(j+1)\hbar^2$$

<u>Application</u> Multiplet des spins et facteur de ? ? ?

Atomes à plusieurs éléctrons

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^{z}\vec{L}_i \quad \vec{S} = \sum_{i=0}^{z}\vec{S}_i$$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$$\mathcal{E}(k,j) \to \mathcal{E}(E_0,L,S,J) \to \{|E_0,L,S,J,M\rangle \quad J \geq M \geq -J\}$$

champ mangétique

$$H = H_0 - \gamma\sum_{i=1}^{z}\left(\vec{L}_{\mathrm{i}} + g\vec{S}_i\right)\cdot\vec{B}$$

dans $\mathcal{E}(E_0,L,S,J) : P_{\mathcal{E}}\left[-\gamma\left(\vec{L}+g\vec{S}\right)\right]P_{\mathcal{E}} = -\gamma\alpha_L\vec{J} - \gamma g\alpha_s\vec{J}$

On remplace $\vec{L}$ et $\vec{S}$ par $\alpha\vec{J}$ dans le Hamiltonien

On réécrit les αs en fonction de produit scalaires.

Les produits scalairs impliquent de calculer :

$$< \vec{L}^2 >_\epsilon = L(L+1)\hbar^2 \quad < \vec{L}\cdot\vec{S} >_{\epsilon_0} = ?$$

Si $\vec{L}+\vec{S}=\vec{J} \implies \vec{J}^2=\vec{L}^2+\vec{S}^2+2\vec{S}\cdot\vec{L} \implies \vec{L}\cdot\vec{S}=\frac{1}{2}\big(J^2-L^2-s^2\big)$

On a finalement que

$$H = H_0 - \gamma g_\mathrm{L}\vec{J}\cdot\vec{B} \quad \text{dans } \mathcal{E}(E_0,L,S,J)$$

Si $\mathbf{B}$ est orienté en z on trouve

$$H = H_0 - \gamma g_\mathrm{L} J_z B \implies H\left|E_0,L,S,J,M\right\rangle = (H_0-\gamma g_\mathrm{L} M\hbar B)\left|E_0,L,S,J,M\right\rangle$$

Théorie des parturbation

En général,

$$H\left|\psi\right\rangle = E\left|\psi\right\rangle$$

n'est pas soluble exactement.

On prend

$$H = \underbrace{H_0}_{\text{soluble}} + \underbrace{W}_{\ll H}$$

$$H_0\left|\varphi_n\right\rangle = E_n^0\left|\varphi_n\right\rangle \quad \langle\varphi_n|\varphi_n'\rangle = \delta_{nn'}$$

on pose $w=\lambda\bar{w} \quad \lambda\ll 1$

On postule

$$E = E_n^0 + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \cdots$$
$$\left|\psi\right\rangle = \left|\varphi_n\right\rangle + \lambda\left|\varphi^{(1)}\right\rangle + \lambda^2\left|\varphi^{(2)}\right\rangle + \cdots$$

Choix :

$$\langle\varphi_n|\psi\rangle = 1 = \underbrace{\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle}_{1} + 0 + 0 + \cdots$$

$$\big(H_0+\lambda\bar{W}\big)\Big[\left|\varphi_n\right\rangle + \lambda\left|\varphi^{(1)}\right\rangle + \lambda^2\left|\varphi^{(2)}\right\rangle + \cdots\Big] = \Big(E_{\lambda^0} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \cdots\Big)\big(\left|\varphi_n\right\rangle + \lambda\left|\varphi^{(1)}\right\rangle + \lambda^2\left|\varphi^{(2)}\right\rangle + \cdots\big)$$

$$O(\lambda^0): \quad H_0\left|\varphi_n\right\rangle = E_n^0\left|\varphi_n\right\rangle$$
$$O(\lambda^1): \quad H_0\left|\varphi^{(1)}\right\rangle + \bar{W}\left|\varphi_n\right\rangle = E_n^0\left|\varphi^{(1)}\right\rangle + E^{(1)}\left|\varphi\right\rangle \implies \cdots \implies E^{(1)} = \left\langle\varphi_n\right|\bar{W}\left|\varphi_n\right\rangle$$

$$O(\lambda^2): \quad H_0 \left|\varphi^{(2)}\right\rangle + \bar{W} \left|\varphi^{(1)}\right\rangle = E_n^? ? + ? + ? \implies \cdots$$

Bon, je note pas tout ça, je l'ai déjà fait une fois, pas une deuxième

$$\implies \left|\varphi^{(1)}\right\rangle = \sum_{g_n} \sum_{m \neq n} \frac{|\varphi_m\rangle \langle \varphi_m| \bar{W} |\varphi_n\rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

$$\implies E^{(2)} = \sum_{g_n} \sum_{m \neq n} \left\| \frac{\langle \varphi_n| \bar{W} |\varphi_n\rangle}{E_n^0 = E_m^0} \right\|^2$$

Théorie des perturbation (?)

Il fait un rappel de la théorie des perturbation, qu'on a fait au dernier cours

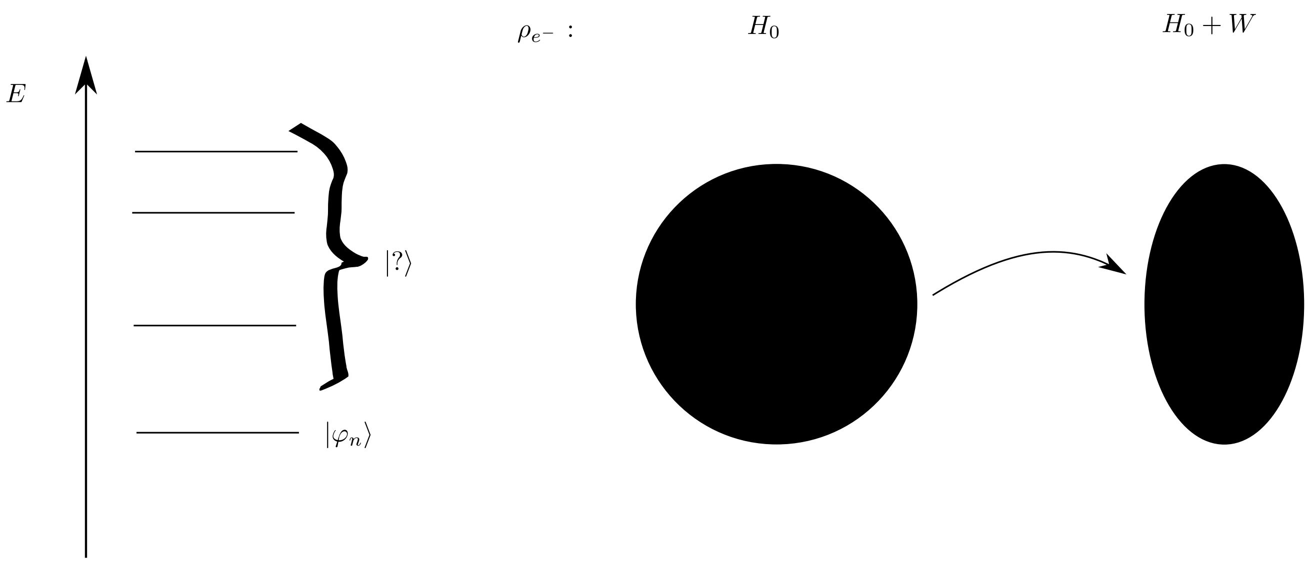

Figure 1 – spectre énérgétique

Cas dégénéré

On pose :

$$|\varphi_{n,\alpha}\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} c_{n,i}^{\alpha} \left|\varphi_n^i\right\rangle$$

On fait un chanement de base pour utilisel les ket α au lieu d'utiliser les ket i

$$H_0 \left|\varphi_n, \alpha\right\rangle = E_n^0 \left|\varphi, \alpha\right\rangle$$

$$H_0 \left|\varphi^{(1)}\right\rangle + W \left|\varphi_{n,\alpha}\right\rangle = E_n^0 \left|\varphi_n^i\right\rangle + E^{(1)} \left|\varphi_{n,\alpha}\right\rangle$$

$$\left\langle\varphi_n^i\right| H_0 \left|\varphi^{(1)}\right\rangle + \left\langle\varphi_n^i\right| W \left|\varphi_{n,\alpha}\right\rangle = \left\langle\varphi_n^i\right| E_n^0 \left|\varphi_n^i\right\rangle + \left\langle\varphi_n^i\right| E^{(1)} \left|\varphi_{n,\alpha}\right\rangle$$

$$\sum_{i=1}^{g_n} \langle \varphi_n^i | \bar{W} | \varphi_n^{i\prime} \rangle \langle \varphi_n^{i\prime} | \varphi_{n,\alpha} \rangle = E^{(1)} \langle \varphi_n^i | \varphi_{n,\alpha} \rangle$$

C'est essentiellement un produit matriciel

$$\det\Big(P_{\mathcal{E}}\Big(\bar{W} = E^(1)\not{1}\Big)P_{\mathcal{E}}\Big) = 0 \to E^{(1)} \text{ valeur propres}$$

On va se limiter en ordre 1 en énérgie, et donc en ordre 0 en état dans le cadre du cours.

L'odre 0 n'est pas trivial même à l'ordre 0 dans le cas dégénéré.

Algorithme

si

$$H = H_0 + W$$

si $|\varphi_n\rangle$ est non-dégénéré : formule sinon

$$E_0 = E_n^0 + \lambda E_\alpha^{(1)}$$

Application : structure fine de l'atome H

rappel : eq dirac :

$$(c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 + V(r))\psi = E\psi \quad V = -\frac{e^2}{r}$$

$$H_{sf} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V + \underbrace{W_{mv} + W_D + W_{SD}}_{\text{perturbation}}$$

$$\boxed{|n = 1, l = 0, n = 0, \pm\rangle = |\varphi_{1s}\rangle}$$

$$|n = 2, l = 0, m = 0, \pm\rangle = |2s\rangle$$

$$|n = 2, l = 1, m \in \{1, 0, -11\}, \pm\rangle = |2p\rangle$$

on définit

$$E_n^0 = -\frac{E_I}{n^2} \qquad E_I = \frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{1}{2}mc^2\alpha^2$$

et

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

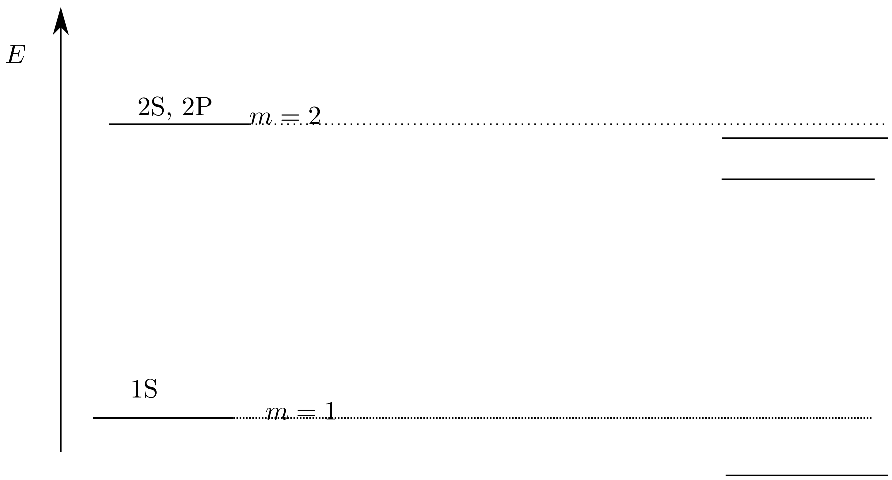

FIGURE 2 – spectre de l'atome d'hydrogene

Niveau 1s

$$E_{1s} = E_{1s}^0 \langle 1,0,0,\pm| \, W_{mv} + W_0 \, |1,0,0,\pm\rangle$$

$$\langle 1,0,0| \otimes \langle 1,0,0| \pm W_0 \, |1,0,0\rangle \otimes |\pm\rangle = \langle 1,0,0| \, W_0 \, |1,0,0\rangle$$

$$= \int \mathrm{d}^3 r \, \langle 1,0,0| \, W_D \, |\vec{r}\rangle \, \langle \vec{r}|1,0,0\rangle = \int \mathrm{d}^3 r \varphi_{1s}(r) \frac{\hbar^2 e^2 \pi}{2m^2c^2} \delta(\vec{r}) \varphi_{1s}(r) = \frac{\hbar^2 e^2 \pi}{2m^2c^2} \underbrace{\|\varphi_{1s}(0)\|^2}_{\frac{1}{\pi a_0^2}} = \frac{1}{2} mc^2 \alpha^4$$

$$\langle 1,0,0,\pm| \underbrace{W_{mv}}_{\frac{-\bar{p}^4}{8m^3c^2}} |1,0,0,\pm\rangle$$

si $\frac{p^2}{2m} H_{0-V} \implies P^4 = (2m)^2 (H_0 - V)^2 = 4m^2 (H_0^2 - H_0 V - V H_0 + V^2)$

$$\langle 1,0,0| \, W_{mv} \, |1,0,0\rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle 1,0,0| \, H_{0^2} - H_0 V - V H_0 + V^2 \, |1,0,0\rangle =$$
$$-\frac{1}{2mc^2} \left(E_{1s}^2 + E_{1s} \langle 1,0,0| \, V \, |1,0,0\rangle + \langle 1,0,0| \, V^2 \, |1,0,0\rangle \right) = -\frac{5}{8} mc^2 \alpha^4$$

(On obtien le résultat après avoir intergrés sur V)

Donc :

$$E_{1s} = E_{1S}^0 + \left(\frac{1}{2} - \frac{5}{8}\right) mc^2\alpha^2$$

Niveau n=2

$$2s : |2,0,0,\pm\rangle\,, \quad g = 2$$
$$2p : |1,2,(\pm1,0),\pm\rangle\,, \quad g = 6$$

$$[\mathbf{L}^2, \mathbf{P}^4] = [\mathbf{L}^2, P^2P^2] = p^2[L^2, P^2] + [L^2, P^2]P^2$$

$$\mathbf{P}^2 = P_{r^2} + L^2 \implies \text{tout commute}$$

$$\implies P^4 \text{ conserve } l$$

$$[L^2, \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}] = L^2, \mathbf{L}]\cdot\ + \mathbf{L}[\mathbf{L}, \mathbf{S}] = 0$$

$$\implies W_{so} \text{ conserve } l$$

$$\langle \pm, 2, 0, 0|\, W_D\, |2,0,0,\pm\rangle = \langle 2,0,0|\, W_d\, |2,0,0\rangle$$

$$\varphi_{2s}(r) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) r^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$(W_{SF})_{\varepsilon_n = 2p} = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} l=0 & l=1 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 2\times 2 & 0 \\ 0 & 6\times 6 \end{pmatrix} \end{array}$$

FIGURE 3 – matrice de Wsf