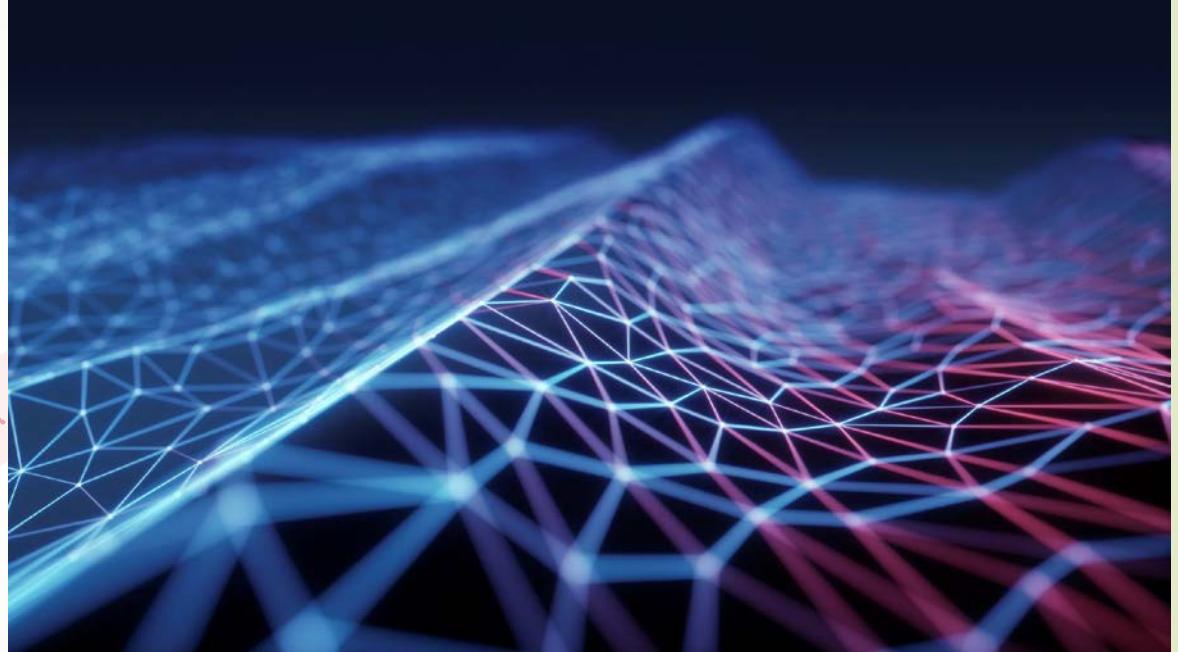


Dr Habib BOUTALEB

Pr El keurti Mohammed

Mécanique Quantique

My. BOUTALEB Habib, Initia



Etudiants fréquentant le cours pour l'année 2025-2026 :

"fatimamedjahdi74@gmail.com" <fatimamedjahdi74@gmail.com>,
"larabihafidha2004@gmail.com" <larabihafidha2004@gmail.com>,
"nonaq9112@gmail.com" <nonaq9112@gmail.com>,
Talbi Djamila <talbidjamila2004@gmail.com>,
ayaterrahmanehafsamaita@gmail.com,
"ha257238@gmail.com" <ha257238@gmail.com>,
"sadounsadoun200@gmail.com" <sadounsadoun200@gmail.com>,
"mohamedher554@gmail.com" <mohamedher554@gmail.com>,
mohammed Elkeurti <melkeurti2000@yahoo.fr>

PLAN D'ÉTUDE SUR 8 SEMAINES

Semaine 1 – Révision et bases

3

- **Objectif** : remettre en place les fondements de la mécanique quantique.
- Rappels : équation de Schrödinger, opérateurs, observables, commutation, valeurs propres, états stationnaires.
- TD : particule dans une boîte, puits infini, énergie quantifiée.

Semaine 2 – Introduction au moment cinétique

Objectif : comprendre la nature du moment cinétique en MQ.

Contenu : définitions opératorielle~~s~~ L_x, L_y, L_z ; relations de commutation ; opérateurs L^2 et L_z .

Exercices : démontrer les commutateurs et trouver les valeurs propres de L_z .

Semaine 3 – États propres du moment cinétique

Importance physique du moment cinétique (orbital et intrinsèque).

Valeurs et vecteurs propres de L^2 et L_z ; représentations $| l, m \rangle$.

Cas particuliers : $j = 1/2, j = 1$.

TD : construction de matrices de L_x, L_y, L_z pour $j = 1/2$.

Semaine 4 – Addition des moments cinétiques

Objectif : apprendre à composer deux moments cinétiques.

Coefficients de Clebsh-Gordan, diagrammes vectoriels, règles de couplage.

TD : calcul des coefficients pour $1/2 \otimes 1/2$ et $1 \otimes 1/2$.

Théorème de Wigner-Eckart et règles de sélection.

Semaine 5 – Potentiel central et atome d'hydrogène (I)

- Définition du champ central, exemples typiques.
- Hamiltonien à symétrie sphérique : séparation des variables dans l'équation de Schrödinger.
- Comportement radial et équation radiale.

Semaine 6 – Potentiel central et atome d'hydrogène (II)

- **Objectif** : résoudre le cas de l'atome d'hydrogène.
- États propres liés, énergie $E_n = -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV}$.
- Symétrie dynamique du potentiel coulombien (constante de Runge-Lenz).
- TD : comparaison entre spectres de l'atome et de l'oscillateur harmonique.

Semaine 7 – Le spin et les interactions

Introduction du spin : insuffisance d'une seule fonction d'onde.

Lagrangien d'une particule dans un champ électromagnétique.

Magnétisme atomique, couplage spin-orbite, renversement du temps.

Semaine 8 – L'oscillateur harmonique quantique (étude approfondie)

- Importance universelle de l'oscillateur harmonique.
- Hamiltonien $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2X^2$.
- Opérateurs de création/annihilation a, a^\dagger .
- Spectre $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$.
- Fonctions d'onde : polynômes d'Hermite, états cohérents.
- TD :
 - Montrer que $[a, a^\dagger] = 1$.
 - Calculer $\langle X^2 \rangle, \langle P^2 \rangle$.
 - Discuter le principe d'incertitude.

Pour la suite , voir les méthodes d'approximations

En mécanique quantique, le but n'est pas de "trouver la trajectoire" d'une particule comme en mécanique classique,

mais de comprendre et prédire les résultats possibles des mesures et leurs probabilités.

On peut dire que la mécanique quantique s'intéresse à trois grands types de choses :

1. Les états physiques d'un système

Chaque système (électron, atome, molécule, photon, etc.) est décrit par un **état quantique**, représenté par un **vecteur d'état** $|\psi\rangle$ ou une **fonction d'onde** $\psi(x, t)$.

Ce vecteur contient **toute l'information possible** sur le système.

Il permet de calculer la probabilité d'obtenir un certain résultat lors d'une mesure.

Analogie :

En mécanique classique, tu décris une particule par sa position et sa vitesse (x, v).

En mécanique quantique, tu la décris par une **fonction d'onde** qui donne la probabilité de la trouver ici ou là.

Les observables et leurs opérateurs

Chaque grandeur mesurable (énergie, moment cinétique, position, etc.) est représentée par un **opérateur hermitien**.

Exemples : $\hat{x} = x$, $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$

Ces opérateurs agissent sur les fonctions d'onde et permettent de calculer :

les **valeurs propres** → les valeurs possibles de la mesure,

les **vecteurs propres** → les états où la grandeur a une valeur bien définie.

En pratique, résoudre un problème quantique revient souvent à **trouver les valeurs propres et les états propres** d'un opérateur (souvent le Hamiltonien \hat{H}).

Les probabilités de mesure

Une fois l'état $|\psi\rangle$ connu, la mécanique quantique ne donne pas un résultat unique, mais une **distribution de probabilités** :

$$P(a_i) = |\langle a_i | \psi \rangle|^2$$

où $|a_i\rangle$ est un état propre d'une observable \hat{A} .

Autrement dit : la mécanique quantique ne dit pas ce qu'il se passera, mais quelle est la probabilité que tel résultat se produise. C'est là la grande différence avec la mécanique classique.

Ce que sont les états propres $|a_i\rangle$

Chaque observable \hat{A}) par exemple l'énergie, le moment cinétique, la position, etc.) possède des **états propres** $|a_i\rangle$ définis par :

$$\hat{A} |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle$$

a_i est la **valeur propre** (le résultat possible de la mesure),

$|a_i\rangle$ est l'état dans lequel le système possède exactement cette valeur.

Si le système est dans cet état propre, alors la mesure de A donnera avec certitude la valeur a_i .

Que représente l'état $|\psi\rangle$

Un état général $|\psi\rangle$ peut être une combinaison (superposition) de plusieurs états propres de \hat{A} :

$$|\psi\rangle = c_1 |a_1\rangle + c_2 |a_2\rangle + c_3 |a_3\rangle + \dots$$

avec des coefficients complexes c_i qu'on appelle **amplitudes de probabilité**).

La superposition signifie que le système n'a pas une valeur définie de A avant la mesure.

Il "contient" plusieurs possibilités en même temps, avec des **probabilités** associées.

Que se passe-t-il quand on mesure A ?

Lorsqu'on mesure l'observable \hat{A} sur l'état $|\psi\rangle$:

le résultat possible est l'une des valeurs propres a_i , la probabilité d'obtenir a_i est :

$$P(a_i) = |\langle a_i | \psi \rangle|^2 = |c_i|^2$$

après la mesure, le système se "réduit" à l'état correspondant $|a_i\rangle$.

1. Ce que dit la théorie (la "règle de la mesure")

Quand un système est dans un état général :

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle$$

où les $|a_i\rangle$ sont les états propres d'une observable \hat{A} .

👉 Si on mesure \hat{A} , la **probabilité** d'obtenir la valeur a_i est :

$$P(a_i) = |c_i|^2$$

Mais **après la mesure**, le système **n'est plus dans la superposition**.

Il se trouve **dans l'état propre** correspondant au résultat obtenu : $|\psi_{\text{après mesure}}\rangle = |a_i\rangle$

C'est ce qu'on appelle **la réduction (ou effondrement) du vecteur d'état**.

On dit aussi "**collapse du paquet d'ondes**".

3. Pourquoi c'est nécessaire (exemple concret)

Prenons un électron avec un spin.

Avant la mesure, disons que son état est une superposition :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z + |-\rangle_z)$$

Si tu passes l'électron dans un **appareil de Stern-Gerlach** orienté selon z , tu verras **deux taches** : une pour $+\hbar/2$ et une pour $-\hbar/2$.

Mais pour **chaque électron individuel**, tu n'en vois qu'une seule tache.

Donc, après la mesure, **ce même électron** a forcément un spin bien défini selon z — par exemple $+\hbar/2$.

Il est donc passé de :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z + |-\rangle_z)$$

à :

$$|+\rangle_z$$

Ce changement brutal est ce qu'on appelle la **réduction du vecteur d'état**.

4. Interprétation physique (et philosophique)

Ce qu'il faut bien comprendre, c'est que :

avant la mesure, le système **n'a pas** de valeur précise pour la grandeur mesurée ;

la mesure **crée** la valeur (au sens où elle la "sélectionne" parmi les possibles).

C'est pourquoi la mécanique quantique est **fondamentalement probabiliste** : on ne prédit pas *le résultat*,

on prédit *les probabilités* des résultats,

et on dit que la mesure "**fait apparaître**" un de ces résultats possibles.

2. Pourquoi on dit ça — le raisonnement logique

Avant la mesure :

le système était dans une superposition de plusieurs possibilités ;
tu ne pouvais qu'attribuer **des probabilités** à chaque résultat.

Après la mesure :

tu **sais** quel résultat a été obtenu,
donc le système **doit maintenant être dans un état qui correspond à ce résultat**.

Autrement dit :

mesurer une grandeur, c'est **forcer le système** à adopter une des valeurs propres possibles de cette grandeur.
C'est un **postulat expérimental**, pas une simple équation mathématique.

5. D'où vient ce postulat ?

C'est une des **règles fondatrices** de la mécanique quantique, formulée dans les années 1920 :

Born (1926) → relie la fonction d'onde à une probabilité.

Dirac & von Neumann → formulent le **postulat de la mesure** :

toute mesure d'une observable \hat{A} fait passer le système dans un des états propres de \hat{A} .

Il n'y a **pas d'explication plus fondamentale** à l'intérieur de la théorie — c'est **un principe expérimental**, confirmé par des milliers d'expériences.

Mr. BOUTALEB Habib, initiation en Mécanique Quantique

Mr. BOUTALEB Habib, Initiation en Mécanique Quantique

Definitions

13

- **Espace de Hilbert** : cadre mathématique abstrait.
- **Vecteur d'état** $| \psi \rangle$: description complète mais abstraite de l'état du système.
- **Fonction d'onde** $\psi(x, t)$: représentation particulière du vecteur d'état dans la base de position.

On pourrait faire une analogie simple :

L'espace de Hilbert = l'espace de tous les vecteurs possibles (comme \mathbb{R}^3).

Le vecteur d'état = un vecteur particulier dans cet espace.

La fonction d'onde = les coordonnées de ce vecteur dans la base des positions.

- Dans la **base des impulsions** $| p \rangle$, la **fonction d'onde impulsion** est :

$$\phi(p, t) = \langle p | \psi(t) \rangle$$

Les deux sont des représentations du même vecteur abstrait $| \psi(t) \rangle$, mais dans des bases différentes.

Lien entre les deux représentations
Les bases $| x \rangle$ et $| p \rangle$ sont reliées par une **transformée de Fourier** :

$$\phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x, t) dx$$

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{+ipx/\hbar} \phi(p, t) dp$$

Donc, si on connaît $\psi(x, t)$, on peut calculer $\phi(p, t)$ et inversement.

- En mécanique quantique, une **base** est simplement un ensemble d'états $|a\rangle$ qui permet de décomposer un vecteur d'état $|\psi\rangle$.
- Pour la position : les états de base sont $|x\rangle$.
- Pour l'impulsion : les états de base sont $|p\rangle$.
- Pour le spin (par exemple un électron avec spin 1/2) : les états de base peuvent être $|\uparrow\rangle$ spin vers le haut et $|\downarrow\rangle$ spin vers le bas , dans une direction choisie (souvent z).

- La **position** et l'**impulsion** forment des bases **continues** : les indices x ou p varient sur \mathbb{R} .
- Le **spin**, lui, forme une base **discrete** : seulement deux états pour un spin 1/2.
Donc la fonction d'onde de spin n'est pas une fonction $\psi(x)$,mais un vecteur à composantes.
Exemple :

où $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ et $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

$$|\psi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle$$

Les postulats fondamentaux de la mécanique quantique

1- L'état quantique

Un système physique est complètement décrit à un instant donné par un **vecteur d'état** $|\psi\rangle$ appartenant à un espace de Hilbert \mathcal{H} .

Dans la **représentation positionnelle**, ce vecteur est associé à une **fonction d'onde** $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$.

Cette fonction contient **toute l'information accessible expérimentalement** : la probabilité de trouver la particule entre x et $x + dx$ est donnée par :

$$P(x) dx = |\psi(x, t)|^2 dx$$

avec la condition de normalisation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad // \text{la particule est présente à 100\% dans l'espace}$$

2. Les observables et opérateurs hermétiques

À toute grandeur physique mesurable A est associé un **opérateur hermétique** \hat{A} agissant sur \mathcal{H} , de sorte que :

$$\hat{A} |\psi_a\rangle = a |\psi_a\rangle$$

où a est une **valeur propre** réelle (car $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$)

Les états $|\psi_a\rangle$ forment une **base orthonormée** :

$$\langle\psi_a|\psi_{a'}\rangle = \delta_{aa'}$$

et tout état peut s'écrire comme une **superposition linéaire** :

$$|\psi\rangle = \sum_a c_a |\psi_a\rangle$$

avec $|c_a|^2$ = probabilité de mesurer la valeur a .

Grandeur Classique Vs Quantique (raisonnement sur le moment cinétique)

En mécanique classique :

une grandeur physique (comme la position, la vitesse, ou le moment cinétique) est un **nombre réel** qu'on peut mesurer à tout instant avec une précision arbitraire.

on peut connaître **simultanément** la position et la quantité de mouvement d'une particule.

En mécanique quantique, au contraire :

une grandeur physique devient un **opérateur** (une "machine" mathématique) qui agit sur une fonction d'onde ψ .

le résultat d'une mesure n'est **pas déterministe**, mais **probabiliste** : on obtient l'une des **valeurs propres** de l'opérateur.

Donc le moment cinétique n'est pas une grandeur classique, parce qu'il :

n'a pas de valeur précise avant la mesure, **agit sur les états quantiques** plutôt que d'être un simple vecteur réel.

Une grandeur physique A (par ex. L_z) a une **valeur précise** dans un état $|\psi\rangle$ seulement si cet état est **propre** de l'opérateur A :

$$A |\psi\rangle = a |\psi\rangle$$

→ dans ce cas, la mesure de A donnera toujours la valeur a .

Mais si deux opérateurs **ne commutent pas** : $[A, B] \neq 0$, alors il est **impossible** d'avoir un état $|\psi\rangle$ qui soit **propre à la fois** de A et de B . Donc on **ne peut pas** connaître simultanément leurs valeurs avec certitude.

ne peut pas être mesuré dans toutes ses composantes à la fois, si on mesure précisément L_z , les mesures de L_x ou L_y deviennent floues.

Comment on interprète cela : Le moment cinétique \vec{L} est un **vecteur d'opérateurs** : $\vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$

Comme L_x, L_y, L_z ne commutent pas, il n'existe pas d'état quantique où les trois valeurs soient fixes en même temps.

Autrement dit : le vecteur \vec{L} n'a pas une orientation bien définie, seules certaines de ses **projections** (comme L_z) peuvent être mesurées précisément. C'est pour cela qu'on dit :

"le moment cinétique n'a pas de valeur précise avant la mesure" (**car il n'y a pas de vecteur fixe**),

"on ne peut pas mesurer toutes ses composantes à la fois" (car elles ne commutent pas).

Exemple simple : le spin 1/2

Prenons le cas du spin d'un électron.

Les opérateurs S_x, S_y, S_z obéissent à :

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z$$

Si tu mesures S_z , tu trouves soit $+\frac{\hbar}{2}$, soit $-\frac{\hbar}{2}$.

Mais à ce moment, S_x et S_y deviennent indéterminés.

Et si tu mesures ensuite S_x , tu "détruis" la connaissance de S_z .

C'est **expérimentalement vérifié** (expérience de Stern-Gerlach avec champs magnétiques successifs).

La commutation et en quoi elle est utile ?

La **commutation** entre deux opérateurs A et B s'exprime par le **commutateur** :

$$[A, B] = AB - BA$$

Si $[A, B] = 0$ Les deux opérateurs **commutent**.

Cela signifie qu'ils **peuvent être mesurés simultanément** avec précision.

Autrement dit : il existe des états ψ qui sont **propres des deux opérateurs à la fois**.

Exemple :

L^2 et L_z commutent, donc on peut connaître le moment total L et sa projection L_z en même temps.

Si $[A, B] \neq 0$ Les deux opérateurs **ne commutent pas**.

Cela signifie qu'ils **ne peuvent pas être connus simultanément** : mesurer l'un modifie la valeur de l'autre. C'est une **conséquence directe du principe d'incertitude**.

Interprétation physique de la non-commutation des composantes du moment cinétique

On a : $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ et ses permutations.

Cela veut dire :

Si on mesure précisément L_x , alors L_y et L_z deviennent **indéterminés**.

Les trois composantes du moment cinétique sont **liées par une incertitude fondamentale**.

C'est un peu comme si, quand on veut bien "voir" la rotation autour d'un axe, la rotation autour des autres axes devient floue.

Utilité concrète de cette notion de commutation

a) Elle indique quelles grandeurs sont observables ensemble

C'est la base de la **théorie des mesures** en MQ.

Exemple :

- L^2 et L_z commutent → observables conjointes possibles.
- L_x et L_y ne commutent pas → impossible de les mesurer simultanément.

b) Elle détermine les bases propres dans lesquelles on travaille

Les relations de commutation servent à construire les **opérateurs de montée et de descente** (par exemple pour l'oscillateur harmonique ou le spin).

Elles permettent d'obtenir toutes les valeurs propres **sans résoudre d'équation différentielle**, juste par algèbre.

Exemple :

$$[L_z, L_+] = +\hbar L_+, [L_z, L_-] = -\hbar L_-$$

→ permettent de "monter" ou "descendre" les valeurs de m .

c) Les relations de commutation définissent comment la nature "voit" les rotations.

C'est pour cela que toute particule possède un **moment cinétique quantique** intrinsèque : le **spin**.

Le spin n'a **aucun équivalent classique**, il vient uniquement de cette structure de commutation.

M. BOUTALEB Habib, Initiation en Mécanique Quantique



Mr. BOUTALEB Habib, Initiation en Mécanique Quantique

Mr. BOUTALEB Habib, Initiation en Mécanique Quantique

3 - Évolution temporelle et équation de Schrödinger

La dynamique d'un système quantique est déterminée par l'**équation de Schrödinger dépendant du temps** :

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

où \hat{H} est l'**hamiltonien**, opérateur hermétique représentant l'énergie totale du système.

Dans la représentation positionnelle :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x, t)$$

Si le potentiel $V(x)$ ne dépend pas du temps, on cherche des **solutions séparables** :

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (e^{-i\omega t}, E = \hbar\omega \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar})$$

ce qui conduit à l'**équation stationnaire** :

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

Cette équation est une **équation aux valeurs propres**, où les solutions $\psi_n(x)$ sont les **états stationnaires** associés aux **niveaux d'énergie** E_n .

2. Commutation et observables compatibles

Deux observables \hat{A} et \hat{B} commutent si :

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

Elles possèdent alors une **base commune de vecteurs propres**, et il est possible de mesurer leurs valeurs simultanément avec certitude.

Ce résultat découle du **théorème de commutation simultanée**.

Exemple :

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Cette non-commutation implique le **principe d'incertitude de Heisenberg** :

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

et interdit toute localisation parfaite de la particule.

Exercice Une particule de masse m est confinée dans un puits de potentiel infini de largeur L :

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ +\infty, & \text{sinon} \end{cases}$$

La particule ne peut pas s'échapper : $\psi(0) = \psi(L) = 0$.

Résolution de l'équation de Schrödinger

À l'intérieur du puits : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$

Les solutions générales sont : $\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$

Conditions aux limites : $\psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0$, $\psi(L) = 0 \Rightarrow \sin(kL) = 0$

D'où : $kL = n\pi$, $n \in \mathbb{N}^*$

$$\text{et } k_n = \frac{n\pi}{L}$$

L'énergie correspondante : $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$

Normalisation et interprétation

La fonction d'onde normalisée :

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1$$

On substitue $\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$:

$$|A|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1.$$

on sait que : $\sin^2 \alpha = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\alpha)$

$$\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{1}{2} \int_0^L [1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)] dx = \frac{1}{2} \left[L - \frac{L}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \Big|_0^L \right] = \frac{L}{2},$$

Probabilité dans une région

Question : quelle est la probabilité de trouver la particule (état fondamental $n = 1$) dans la moitié gauche du puits ?

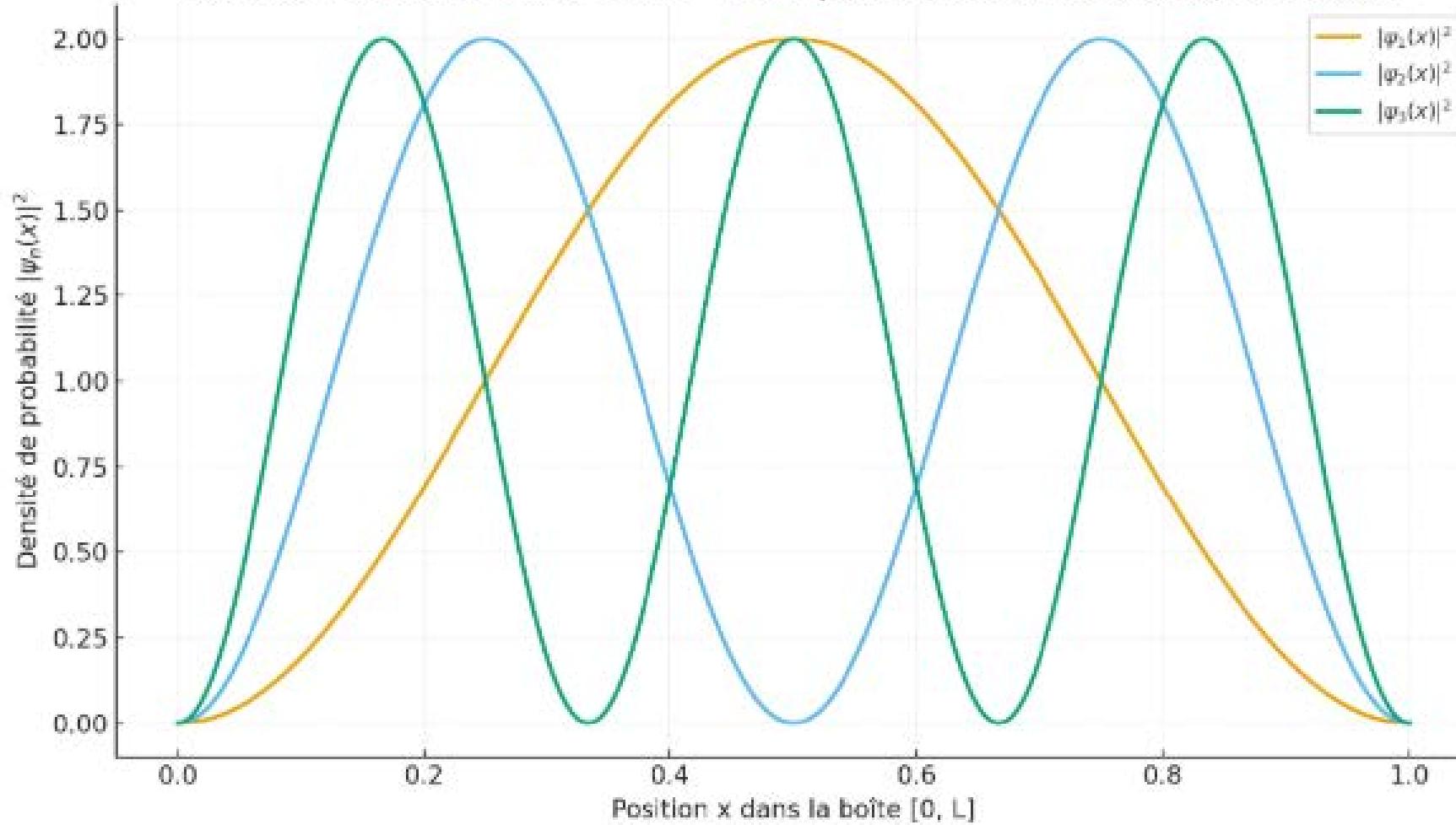
$$P(0 < x < L/2) = \int_0^{L/2} |\psi_1(x)|^2 dx$$

Substituons :

$$P = \frac{2}{L} \int_0^{L/2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = 1/2$$

La probabilité est **égale à 1/2** : la particule a la même chance d'être à gauche ou à droite.

Particule dans une boîte infinie - trois premiers états stationnaires exacts



Interpretation :

31

La **quantification** des niveaux d'énergie est une conséquence directe des **conditions aux limites imposées à la fonction d'onde**.

Contrairement à la mécanique classique, où une particule confinée peut avoir n'importe quelle énergie $E > 0$.

Par exemple, si vous considérez le billard : une balle dans une boîte rectangulaire, la balle peut avoir toutes sortes de vitesses et donc toutes sortes d'énergies.

la mécanique quantique impose que la fonction d'onde soit **continue, dérivable et nulle sur les parois** (ici en $x = 0$ et $x = L$).

- ▶ Ces conditions imposent que seule une famille discrète de fonctions vérifie l'équation de Schrödinger

Autrement dit :

- ▶ La **quantification n'est pas ajoutée "à la main"** : elle émerge naturellement du formalisme.
- ▶ Les **conditions aux limites physiques** (parois infinies) jouent un rôle analogue à celui des **conditions de résonance** en acoustique ou en optique (longueurs d'onde stationnaires).
- ▶ Une analogie utile :

Une corde fixée aux deux extrémités ne peut vibrer que pour certaines fréquences propres : les ondes stationnaires.

De même, la particule quantique dans un puits ne peut exister que pour certaines "vibrations de probabilité" (les fonctions d'onde admissibles)

Discontinuité du spectre d'énergie

Le spectre des énergies E_n est **discret** et **quadratique** en n :

$$E_n \propto n^2.$$

Cela signifie :

- les niveaux sont **inégalement espacés** (plus espacés à basse énergie, plus denses à haute énergie) ;
- entre deux **niveaux consécutifs**, **aucun état stationnaire** n'est possible.

Consequence :

Une transition d'un niveau E_n à un autre E_m ne peut libérer ou absorber qu'un **quantum d'énergie** :

$$\Delta E = E_m - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (m^2 - n^2).$$

C'est ce principe qui fonde les spectres discrets d'émission et d'absorption observés en physique atomique.

Mécanique Classique vs Mécanique Quantique

Mécanique Classique : Énergies Continues

Une particule (comme une balle de billard) peut avoir n'importe quelle énergie positive.

Exemple : Une balle de billard dans une boîte peut rouler à des vitesses différentes, générant une gamme continue d'énergies cinétiques.

Mécanique Quantique : Énergies Discrètes

Une particule dans une boîte (comme un atome dans un potentiel atomique) ne peut occuper que des niveaux d'énergie spécifiques et discrètes.

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \quad \text{pour } n = 1, 2, 3, \dots$$

Exemple : Atome d'Hydrogène : Les niveaux d'énergie sont donnés par :

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \quad \text{pour } n = 1, 2, 3, \dots$$

énergie quantique

Transitions d'États

- **Description** : Une transition entre deux niveaux d'énergie E_n et E_m implique l'absorption ou l'émission d'une quantité d'énergie spécifique $\Delta E = E_m - E_n$.
- **Quantum d'Énergie** : Cette quantité d'énergie est un multiple de $h\nu$, où ν est la fréquence du photon absorbé ou émis.
- **Exemple** : Si un électron passe du niveau $n = 2$ au niveau $n = 1$, il émet un photon dont l'énergie est :

$$\Delta E = E_1 - E_2 = -13.6 \text{ eV} + 3.4 \text{ eV} = -10.2 \text{ eV}$$

- **Fréquence du Photon** : La fréquence ν du photon émis est :

$$h\nu = 10.2 \text{ eV} \implies \nu = \frac{10.2 \text{ eV}}{h}$$

My BOUT'

Rupture avec la physique classique

En mécanique classique, une particule confinée entre deux murs rebondit indéfiniment : elle peut avoir **toute énergie continue** $E > 0$, et sa position est déterminée en fonction du temps $x(t)$.

En mécanique quantique :

- La particule **n'a pas de trajectoire** ; la notion de "chemin" est remplacée par une **distribution de probabilité**.
- L'énergie **n'est pas continue**, mais prend des **valeurs discrètes**.
- Le **principe d'incertitude** interdit de connaître simultanément position et impulsion avec précision :

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

- Dans le puits, $\Delta x \sim L/2$, donc $\Delta p \gtrsim \hbar/L$.

Cela explique pourquoi le niveau fondamental E_1 est **non nul** : la particule ne peut être parfaitement immobile (sinon Δx et Δp violeraient le principe de Heisenberg).

Ainsi, la **quantification** et le **principe d'incertitude** sont **étroitement liés** :

La contrainte de confinement augmente la précision sur x , donc la dispersion sur p , ce qui crée une énergie minimale.

Rôle de la fonction d'onde — Interprétation probabiliste

La fonction d'onde $\psi(x)$ ne décrit **pas une position précise**, mais une **amplitude de probabilité**.

La grandeur mesurable est $|\psi(x)|^2$: la **densité de probabilité de présence**.

Pour la particule dans la boîte :

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

- $|\psi_1(x)|^2$ (état fondamental) a un **maximum au centre** $x = L/2$: la particule est plus susceptible d'y être trouvée.
- Pour $n > 1$, on observe des **nœuds** (zones où la probabilité est nulle) : ce sont les points où la particule **ne peut jamais être détectée**.
- Ces nœuds ne signifient pas que la particule "rebondit" ou "s'arrête" : ils expriment l'**interférence destructive** des composantes d'onde.

Le concept central est donc :

La mécanique quantique ne décrit pas ce que la particule fait, mais ce qu'on peut observer d'elle.

Transition vers la limite classique

Quand n devient très grand :

$$E_n \approx \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \rightarrow \text{continuum}$$

et la densité de probabilité $|\psi_n(x)|^2$ oscille rapidement :

- sa moyenne spatiale tend vers une valeur constante,
- la probabilité de trouver la particule devient **uniforme** sur l'intervalle $[0, L]$.

→ C'est la **limite classique** : la particule se trouve avec la même probabilité partout dans la boîte, comme en mécanique classique.

Cette transition illustre le **principe de correspondance** de Bohr :

Pour des nombres quantiques élevés, la mécanique quantique reproduit les résultats de la physique classique.

Mr. BOUTALEB Habib, Initiation en Mécanique Quantique

Rappel – Transformée de Fourier (continue)

Soit une fonction $f(t)$ définie sur \mathbb{R} .

Sa transformée de Fourier $F(\omega)$ est définie par :

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$$

et la transformée inverse :

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

Interprétation

- La transformée de Fourier décompose un **signal temporel** $f(t)$ en **composantes fréquentielles**.
- $F(\omega)$ indique **quelle amplitude et quelle phase** sont présentes à chaque fréquence angulaire ω .

Propriétés importantes

Linéarité :

$$af_1(t) + bf_2(t) \leftrightarrow aF_1(\omega) + bF_2(\omega)$$

Décalage temporel :

$$f(t - t_0) \leftrightarrow e^{-i\omega t_0} F(\omega)$$

Dérivée :

$$\frac{df(t)}{dt} \leftrightarrow i\omega F(\omega)$$

Convolution :

$$f * g \leftrightarrow F(\omega)G(\omega)$$

Exemple simple

Prenons : $f(t) = \cos \omega_0 t$

Sa transformée de Fourier est :

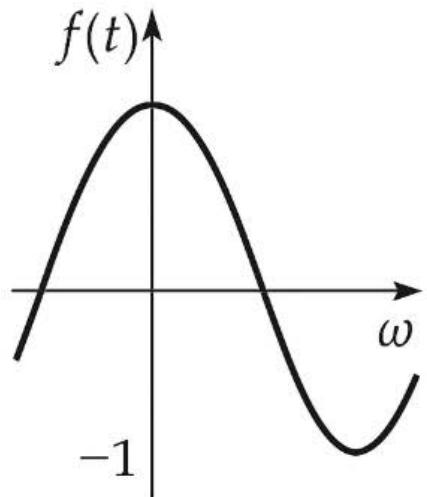
$$F(\omega) = \pi[\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)]$$

Cela veut dire :

Il y a **deux composantes fréquentielles** à $+\omega_0$ et $-\omega_0$, chacune avec la même **amplitude**, et une **phase nulle** (car c'est un cosinus pur).

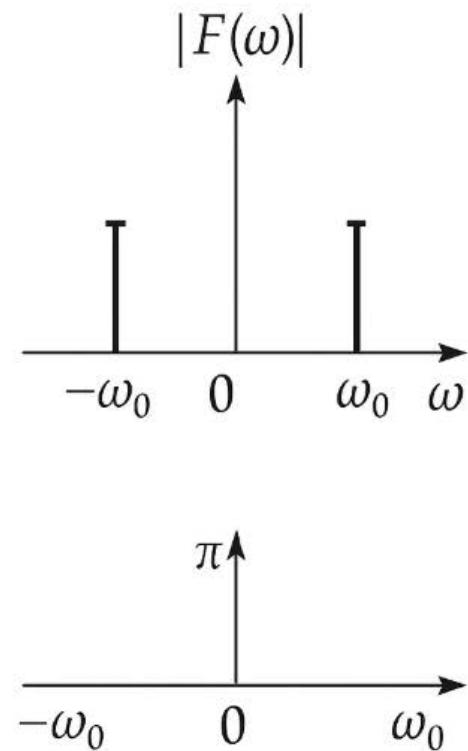
Signal

$$f(t) = \cos(\omega t)$$

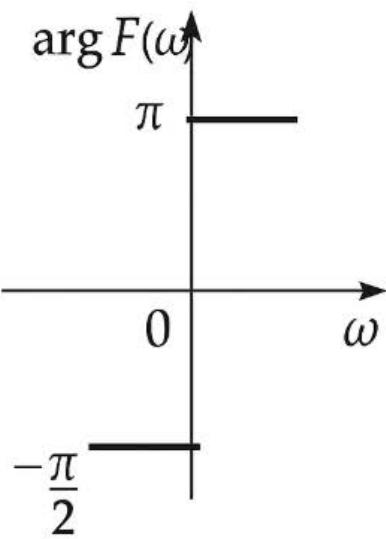


$$f(t) = \cos(\omega_0 t)$$

Amplitude Spectrum



Phase Spectrum



Exercice 1

Prenons une fonction exponentielle décroissante :

$$f(t) = e^{-at}u(t), a > 0$$

où $u(t)$ est 0 pour $t < 0$, 1 pour $t \geq 0$.

Calcul de la transformée :

$$F(\omega) = \int_0^{+\infty} e^{-at} e^{-i\omega t} dt = \int_0^{+\infty} e^{-(a+i\omega)t} dt$$

$$F(\omega) = \frac{e^{-\infty}}{a+i\omega}$$

Interprétation :

Le spectre $F(\omega)$ est **concentré autour de $\omega = 0$** .

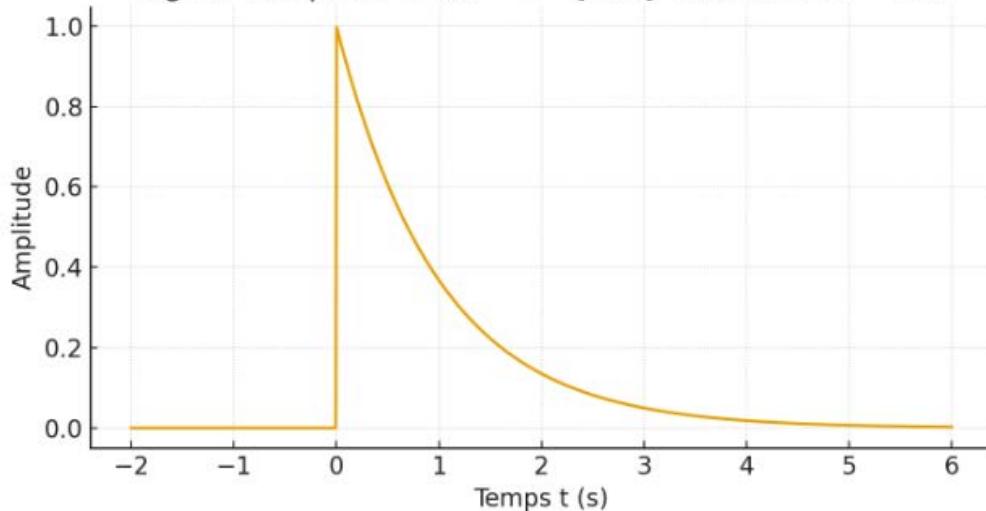
Plus a est grand, plus $f(t)$ décroît vite dans le temps → **spectre plus large** (principe d'incertitude de Fourier).

Interprétation :

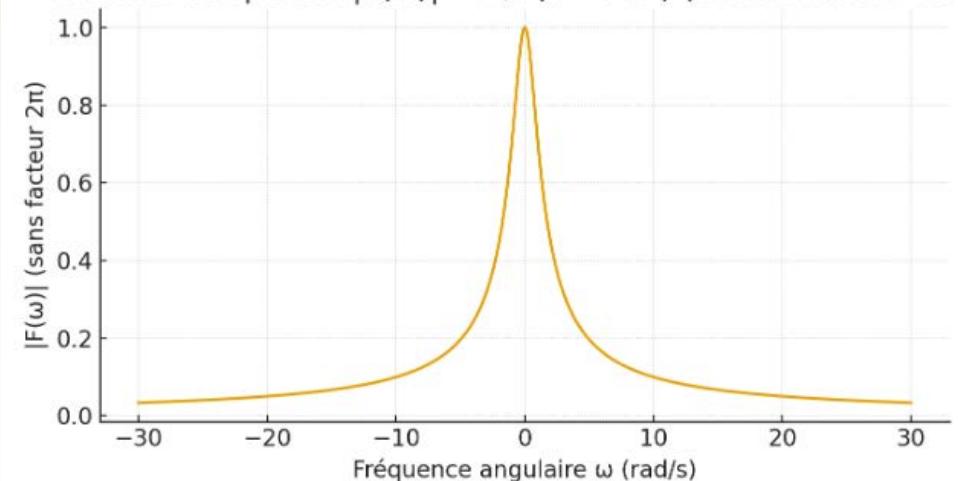
Le spectre $F(\omega)$ est **concentré autour de $\omega = 0$** .

Plus a est grand, plus $f(t)$ décroît vite dans le temps → **spectre plus large** (principe d'incertitude de Fourier).

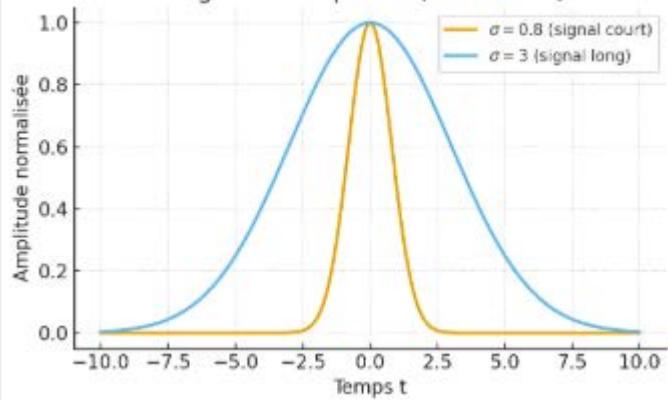
Signal temporel : $f(t) = e^{-at} u(t)$ avec $a = 1.0$



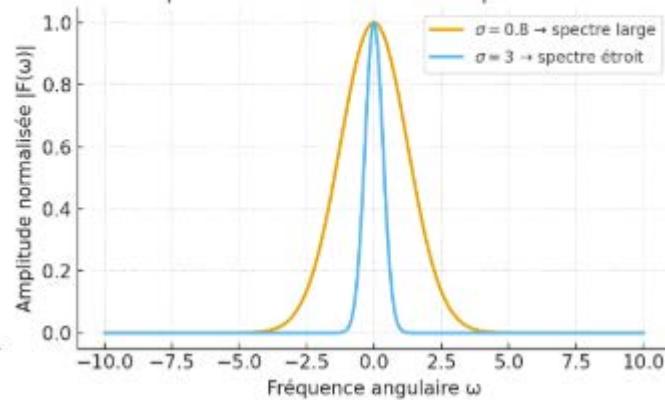
Module du spectre $|F(\omega)| = 1/\sqrt{a^2 + \omega^2}$ (centré autour de 0)



Signaux temporels (Gaussiens)



Spectres de Fourier correspondants



- un signal bien localisé dans le temps occupe une large bande de fréquences
- et inversement, un signal long (étalé) est presque "monochromatique"

Exercice 2 :

Trouver la transformée de Fourier de la fonction porte :

$$f(t) = \begin{cases} 1, & |t| \leq \frac{T}{2} \\ 0, & |t| > \frac{T}{2} \end{cases}$$

Solution :

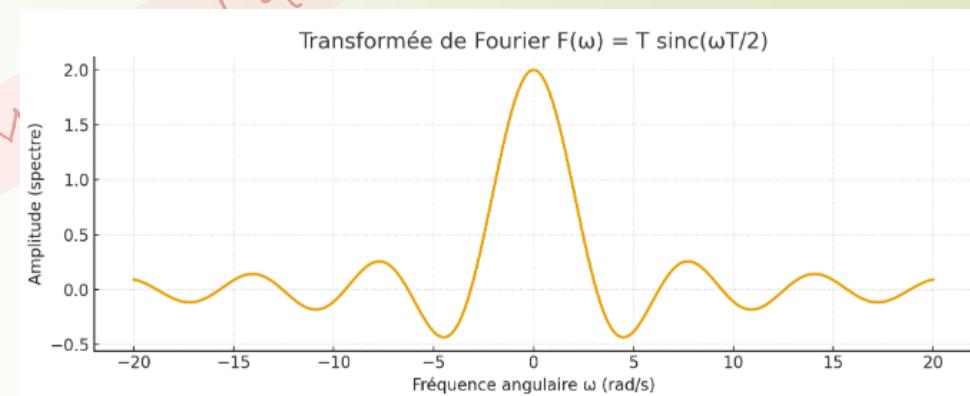
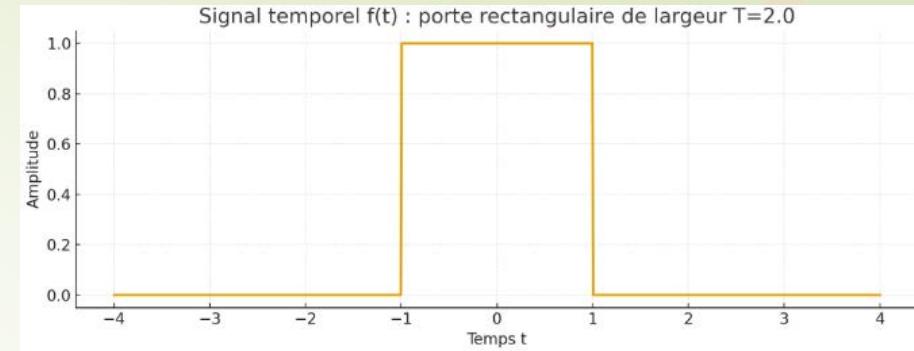
$$F(\omega) = \int_{-T/2}^{T/2} e^{-i\omega t} dt$$

$$F(\omega) = T \operatorname{sinc}\left(\frac{\omega T}{2}\right)$$

avec $\operatorname{sinc}(x) = \frac{\sin x}{x}$

Remarques :

- Le spectre est une **fonction sinc**, c'est-à-dire une onde principale entourée de lobes décroissants.
- Cela montre le principe : **signal court → spectre large**.



Objectifs

1. Comprendre ce qu'est le **moment cinétique quantique** (interprétation physique et mathématique).
2. Apprendre à manipuler les opérateurs L_x, L_y, L_z .
3. Découvrir leurs **relations de commutation** et les conséquences sur les mesures possibles.
4. Calculer les **valeurs propres** de L^2 et L_z .

Lien avec la mécanique Classique

En **mécanique classique**, le moment cinétique (ou moment angulaire) d'une particule est :

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

$\vec{r} = (x, y, z)$ est la position,

$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ est la quantité de mouvement.

Dans un champ central (comme autour d'un noyau d'atome), ce moment mesure **la rotation** ou **la "quantité de mouvement de rotation"**.

Exemple intuitif : Si on fait tourner une balle attachée à une ficelle, plus la balle tourne vite ou plus la ficelle est longue, plus le moment cinétique est grand.

Passage à la mécanique quantique

En mécanique quantique, \vec{r} et \vec{p} deviennent des **opérateurs**.

Ainsi, on définit l'opérateur du moment cinétique comme :

$$\hat{L} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \quad \text{avec : } \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

Mr. BOUTALEB Habib, Initiation en Mécanique Quantique

Composantes explicites :

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right),$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right),$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Relations de commutation

Le moment cinétique n'est pas une grandeur classique : les composantes L_x, L_y, L_z **ne commutent pas entre elles.**

On trouve :

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

Ces relations sont fondamentales.

Elles traduisent **l'impossibilité de mesurer simultanément** les trois composantes du moment cinétique avec précision absolue (principe d'incertitude généralisé).

Conséquence directe :

On peut mesurer **une seule composante** (généralement L_z) (et le **moment total** $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$).

Valeurs propres et quantification

On cherche les **états propres** (c'est-à-dire les fonctions d'onde ψ) tels que :

$$\begin{cases} L^2\psi = \lambda\psi, \\ L_z\psi = \mu\psi \end{cases} \text{ où } \lambda \text{ et } \mu \text{ sont les valeurs propres.}$$

La théorie montre que (voir Cohen Tannoudji - tome1):

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1), l = 0, 1, 2, \dots$$

$$\mu = \hbar m, m = -l, -l+1, \dots, +l$$

Donc pour chaque l , il y a $2l+1$ valeurs possibles de m .

Exemple : cas $l = 1$

$$\begin{cases} L^2 = 2\hbar^2, \\ m = -1, 0, 1. \end{cases}$$

Cela correspond à trois orientations possibles du vecteur moment cinétique par rapport à l'axe z.

En mécanique classique, l'orientation est continue ; ici elle est **discrete**.

D'une façon Générale, nous continuons avec la notation $\vec{J} = (J_x, J_y, J_z)$ qui est le moment cinétique total.

$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ tel que \vec{L} est le moment **orbital** et \vec{S} , le moment de **spin**

les composantes du moment \vec{J} vérifient également les relations suivantes :

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

Mais attention :

$$[L_i, S_j] = 0$$

car les deux agissent sur des espaces différents (l'un spatial, l'autre intrinsèque)

Définition des opérateurs de montée et descente

On introduit deux combinaisons linéaires très utiles :

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad J_- = J_x - iJ_y$$

Ces opérateurs permettent de faire "monter" ou "descendre" la valeur de m , c'est-à-dire la projection du moment sur l'axe z.

Relations de commutation fondamentales

Partons des relations de base pour en déduire celles des opérateurs J_{\pm} .

a) Commutateur $[J_z, J_+] = ?$

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

Finalement : $[J_z, J_+] = +\hbar J_+$

De la même manière on montre que : $[J_z, J_-] = -\hbar J_-$

Commutateur $[J_+, J_-] = ???$

$$[J_+, J_-] = [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] = [J_x, J_x] - i[J_x, J_y] + i[J_y, J_x] + [iJ_y, -iJ_y] = 2\hbar J_z$$

Donc : $[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$

Conséquence physique : opérateurs d'échelle

Les relations précédentes signifient :

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

Alors, doucement, on regarde bien ça :

$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$ donc si l'application de J_z sur un état donne comme valeur propre $\hbar(m+1)$, c'est que cet état peut être $|j, m+1\rangle$, mais d'après la relation précédente $J_+ |j, m\rangle$ est un état propre de J_z , on peut ainsi dire ou conclure que

$$J_+ |j, m\rangle \propto |j, m+1\rangle$$

et de même :

$$J_- |j, m\rangle \propto |j, m-1\rangle$$

Autrement dit, J_+ fait monter la projection m d'une unité, et J_- la diminue d'une unité.

C'est pour cela qu'on les appelle : **opérateur de montée J_+** **opérateur de descente J_-**

Calcul du coefficient de normalisation

On cherche la constante C telle que :

$$J_+ | j, m \rangle = C_{j,m} | j, m + 1 \rangle$$

Pour la déterminer, on part de la norme de cet état : $\langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle = | C_{j,m} |^2$

Or, on sait que : $J_- J_+ = J^2 - J_z(J_z + \hbar)$ (voir diapositive suivante, relations utiles)

et que : $J^2 | j, m \rangle = \hbar^2 j(j + 1) | j, m \rangle$ $J_z | j, m \rangle = \hbar m | j, m \rangle$

D'où :

$$| C_{j,m} |^2 = \hbar^2 [j(j + 1) - m(m + 1)]$$

On choisit $C_{j,m}$ réel et positif, donc :

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

et, de même :

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

Mr. BOUTALEB Habib, Initiation en Mécanique Quantique

Relations utiles :

Nous avons établit la relation suivante : $[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$

Donc, on peut écrire :

$$J_+ J_- - J_- J_+ = 2\hbar J_z$$

Ainsi : $J_- J_+ = J_+ J_- - 2\hbar J_z$

$$J_+ J_- = (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 - iJ_x J_y + iJ_y J_x + J_y^2$$

$J_+ J_- = J_x^2 + \hbar J_z + J_y^2$ on porte cette relation dans la précédente :

$$J_- J_+ = J_+ J_- - 2\hbar J_z = J_x^2 + \hbar J_z + J_y^2 - 2\hbar J_z$$

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

Mr. BOUTALEB Habib, Initiation en Mécanique Quantique

$$|C_{j,m}|^2 = \langle j'm' | J_- J_+ | jm \rangle$$

M. BOUTALEB Habib, Initiation en Mécanique Quantique

Donc dans la relation : $J_+ | j, m \rangle = C_{j,m} | j, m + 1 \rangle$

MR.

BOUTALEB Habib, initiation en Mécanique Quantique

Cas extrêmes et nombre d'états

Il existe deux états particuliers :

$$J_+ |j, j\rangle = 0 \quad J_- |j, -j\rangle = 0$$

et les valeurs possibles de m sont :

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

soit **2j + 1 états possibles** pour chaque j .

Exemple numérique

Prenons $j = 1$ (moment cinétique entier).

$$m = -1, 0, +1$$

Appliquons J_+ successivement :

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

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

$$J_+ |1, 1\rangle = 0$$

Même chose pour J_- mais dans le sens inverse.

Sens physique (résumé simple)

- Le système a un **moment total J** de norme fixée :

$$|\vec{J}| = \hbar\sqrt{j(j+1)}$$

- Mais son **orientation** sur l'axe z est quantifiée :

$$J_z = m\hbar, \quad m = -j, \dots, +j$$

- Les opérateurs J_{\pm} permettent de passer d'une orientation quantifiée à une autre : ce sont les "échelles de rotation quantique".

TD — Opérateurs d'échelle J_{\pm}

Exercice 1 — Commutateurs de base

En partant de $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$ et permutations cycliques :

1. Définir $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$.

2. Démontrer :

a) $[J_z, J_+] = \hbar J_+$;

b) $[J_z, J_-] = -\hbar J_-$;

c) $[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$.

Correction

1. Par définition $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$.

2a) $[J_z, J_+] = [J_z, J_x + iJ_y] = [J_z, J_x] + i[J_z, J_y] = i\hbar J_y + i(-i\hbar J_x) = \hbar(J_x + iJ_y) = \hbar J_+$.

2b) Même calcul $\Rightarrow [J_z, J_-] = -\hbar J_-$.

2c) $[J_+, J_-] = [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] = -i[J_x, J_y] + i[J_y, J_x] = -i(i\hbar J_z) + i(-i\hbar J_z) = 2\hbar J_z$.

Exercice 2 — Action “échelle” de J_{\pm}

61

Soit la base propre $\{|j, m\rangle\}$ telle que :

$$\begin{cases} J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \\ J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \end{cases}$$

1. Montrer que $J_+ |j, m\rangle \propto |j, m+1\rangle$ et $J_- |j, m\rangle \propto |j, m-1\rangle$.
2. Trouver les **coefficients de normalisation** $C_{j,m}^{(+)}$ et $C_{j,m}^{(-)}$ définis par :

$$J_+ |j, m\rangle = C_{j,m}^{(+)} |j, m+1\rangle$$

$$J_- |j, m\rangle = C_{j,m}^{(-)} |j, m-1\rangle$$

Correction de : Avec $[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}$,

$$J_z(J_{\pm} | jm\rangle) = (J_z J_{\pm} \pm \hbar J_{\pm}) | j, m\rangle = \hbar(m \pm 1)(J_{\pm} | jm\rangle),$$

donc $J_{\pm} | j, m\rangle$ est (au facteur près) un vecteur propre de J_z de valeur propre $\hbar(m \pm 1) \Rightarrow$ proportionnel à $| j, m \pm 1\rangle$.

- Utiliser $J_- J_+ = J^2 - J_z(J_z + \hbar)$ et $J_+ J_- = J^2 - J_z(J_z - \hbar)$. Alors

$$\| J_+ | j, m\rangle \|^2 = \langle j, m' | J_- J_+ | jm\rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)].$$

On choisit le coefficient réel et positif :

$$C_{j,m}^{(+)} = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}.$$

De même,

$$C_{j,m}^{(-)} = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$$

Exercice 3 — États extrêmes et cardinalité

1. Montrer qu'il existe des états $|j,j\rangle$ et $|j,-j\rangle$ tels que

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

2. En déduire que m parcourt $-j, -j + 1, \dots, j - 1, j$ et que le **nombre d'états** est $2j + 1$.

Correction.

1. Si on pouvait encore éléver $|j,j\rangle$, on obtiendrait un $m = j + 1$ incompatible avec le spectre fini (norme de J fixée) : on doit donc avoir $J_+ |j,j\rangle = 0$. Même idée en bas de l'échelle.

2. L'application répétée de J_{\pm} relie tous les m entre $-j$ et j par pas de 1 \Rightarrow il y a $2j + 1$ valeurs possibles.

Exercice 4 — Cas concret $j = 1$

Pour $j = 1$, les valeurs de m sont $-1, 0, 1$.

1. Calcule $J_+ | 1, -1\rangle$ et $J_+ | 1, 0\rangle$.

2. Vérifie que $J_+ | 1, 1\rangle = 0$.

3. Même questions pour J_- en partant de $| 1, 1\rangle$.

Correction.

Donc

Pour J_- :

d'où

$$C_{1,-1}^{(+)} = \hbar\sqrt{1 \cdot 2 - (-1) \cdot 0} = \hbar\sqrt{2}, \quad C_{1,0}^{(+)} = \hbar\sqrt{2 - 0 \cdot 1} = \hbar\sqrt{2}.$$

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

$$C_{1,1}^{(-)} = \hbar\sqrt{2}, C_{1,0}^{(-)} = \hbar\sqrt{2},$$

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

Exercice 5 — Cas semi-entier $j = \frac{3}{2}$

Lister toutes les actions non nulles de J_+ et J_- entre les états $|3/2, m\rangle$ avec $m = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$ (et donner les coefficients.

Correction : en utilisant : $\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}$ avec $j = \frac{3}{2}$, on obtient:

$$\begin{aligned} J_+ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= \hbar\sqrt{3} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, & J_- \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= \hbar\sqrt{3} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \\ J_+ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar\sqrt{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, & J_- \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar\sqrt{2} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \\ J_+ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar\sqrt{1} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle, & J_- \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar\sqrt{1} \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle, \\ J_+ \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= 0; & J_- \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= 0. \end{aligned}$$

Exercice 6 — Une identité utile (ca deverait etre exo 0)

Prouver $J_-J_+ = J^2 - J_z(J_z + \hbar)$ et $J_+J_- = J^2 - J_z(J_z - \hbar)$.

Correction (idée).

Écrire $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ et utiliser

$$J_-J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i[J_x J_y]$$

puis $[J_x J_y] = i\hbar J_z$. Terminer en regroupant avec J_z^2 .

Mr. BOUTALEB Habib, Initiation en Mécanique Quantique

M. BOUTALEB Habib, Initiation en Mécanique Quantique

Objectif : pourquoi ℓ doit être entier pour l'orbital

Pour comprendre ça, on va partir de façon simple,

On se place dans un **problème à potentiel central** (atome d'hydrogène, par exemple).

La fonction d'onde dépend des coordonnées sphériques (r, θ, φ).

On sépare les variables : $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi)$

La partie angulaire $Y(\theta, \varphi)$ est définie **sur une sphère (les directions possibles)**.

L'angle φ mesure la rotation **autour de l'axe z**. Si on fait un tour complet 2π autour de l'axe, on revient au même point physique. Donc,

$$\psi(r, \theta, \varphi + 2\pi) = \psi(r, \theta, \varphi)$$

Or, la partie φ de la solution a la forme : $Y(\theta, \varphi) \propto e^{im\varphi}$

Si on fait $\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi$:

$$e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi} e^{i2\pi m}$$

Ainsi, il faut que $e^{i2\pi m} = 1$, ceci n'est valable que si : m est un **entier** ($\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$).

Donc **la projection m du moment cinétique orbital doit être entière**.

Et le ℓ alors ?

L'équation sur θ impose que ℓ soit un **entier $\geq |m|$** : $\ell = 0, 1, 2, \dots, m = -\ell, \dots, \ell$

Alors que pour le **spin**, il n'y a pas de fonction d'onde $\psi(\theta, \varphi)$ derrière on peut avoir $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$

Expression de L^2 et L_z en coordonnées sphériques (utiles par la suite).

70

Pour un moment cinétique orbital (lié aux coordonnées angulaires), on a :

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

Les **fonctions propres** de L^2 et L_z sont les **harmoniques sphériques** $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$, définies par :

$$L^2 Y_\ell^m = \hbar^2 \ell (\ell + 1) Y_\ell^m, \quad L_z Y_\ell^m = \hbar m Y_\ell^m$$

avec par ailleurs :

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Le Spin – sommaire

1. Comprendre ce qu'est le spin (physiquement et mathématiquement).
2. Construire les opérateurs S_x, S_y, S_z .
3. Comprendre pourquoi le spin 1/2 est **demi-entier** (contrairement à ℓ).
4. Manipuler les matrices de Pauli.
5. Calculer l'action de S_{\pm} sur les états $| s, m_s \rangle$.

C'est quoi le spin ?

72

Le spin n'a pas d'équivalent classique.

Ce **n'est pas** la rotation d'une petite boule autour d'elle-même. C'est :

- une **propriété intrinsèque**, comme la charge électrique,
- un **moment cinétique quantique interne**,
- qui existe même si la particule ne bouge pas.

L'électron porte un spin : $s = \frac{1}{2}$

et sa projection sur un axe (par convention l'axe

~~z)~~ peut être : $m_s = +\frac{1}{2}$ ou $m_s = -\frac{1}{2}$

Dans l'effet Stern-Gerlach, on voit **deux taches** seulement : haut (spin up) et bas (spin down).

Les opérateurs du spin $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ vérifient la même algèbre que \vec{J} : $[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$

Pourquoi le spin 1/2 n'est pas décrit par des harmoniques sphériques ?

Parce qu'un spin n'est **pas la rotation dans l'espace réel**, mais une rotation dans un espace interne dit « spinoriel ».

Une rotation de 2π produit : $|\psi\rangle \rightarrow -|\psi\rangle$ et pas $|\psi\rangle$.

C'est impossible pour une fonction d'onde ordinaire $f(\theta, \varphi)$, mais possible pour un **spinor**.

C'est pour cela que le spin peut être

$$s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$$

Pour un moment cinétique de spin s , l'espace des états a la dimension : $2s + 1$

73

Donc pour :

$s = 1 \rightarrow 3$ états \rightarrow matrices 3×3

$s = 1/2 \rightarrow 2$ états \rightarrow matrices 2×2

$s = 3/2 \rightarrow 4$ états \rightarrow matrices 4×4

Donc **forcément**, le **spin 1/2** doit être décrit par des matrices **2×2** .

$|s, m_s\rangle$: si $s = 1/2$, alors $m_s = -1/2$ et $+1/2$ comme le pour l , le m va de $-m$ à $+m$ avec un pas =1

$$|s, m_s\rangle = \left\{ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$$

On note : Base standard : $|\uparrow\rangle = \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle$ et $|\downarrow\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$

Ce sont des vecteurs abstraits, mais on les représente souvent comme :

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Les opérateurs de spin doivent satisfaire les relations de commutations du moment cinétique :

$$[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k$$

On cherche donc des matrices **2×2** qui satisfont exactement ces commutateurs.

Il n'existe qu'une seule famille de matrices 2×2 qui satisfait cette algèbre : **les matrices de Pauli**.

C'est pour cela qu'elles sont *uniques* et *obligatoires* pour décrire un spin 1/2.

Les matrices de Pauli, elles sont définies comme suit :

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

Elles sont :

hermitiennes (donc observables physiques),

Commutateurs des matrices de Pauli

Calculons :

$$[\sigma_x, \sigma_y] = \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x$$

On trouve :

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$$

Et par cyclicité :

$$[\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x$$

$$[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$$

Ce sont exactement les relations du moment cinétique **mais sans \hbar** et avec un facteur 2.

Donc les matrices de spin doivent être : $S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$

Parce que :

$$[S_i, S_j] = \frac{\hbar^2}{4} [\sigma_i, \sigma_j] = \frac{\hbar^2}{4} (2i \varepsilon_{ijk} \sigma_k) = i\hbar \left(\frac{\hbar}{2} \sigma_k \right) = i\hbar S_k$$

Opérateurs de montée et descente : S_+ , S_-

Comme pour J , on définit :

$$S_+ = S_x + iS_y \quad S_- = S_x - iS_y$$

Dans la base $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$, on trouve :

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

Action :

$$S_+ |\downarrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle, \quad S_+ |\uparrow\rangle = 0$$

$$S_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle, \quad S_- |\downarrow\rangle = 0$$

Valeurs propres de S^2 et S_z :

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbf{1}$$

$$S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \quad S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle$$

Les états du spin deviennent des vecteurs dans \mathbb{C}^2

On pose : $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Alors : **Action de S_z**

$$S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle$$

$$S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle$$

Donc les valeurs propres de S_z sont $\pm \hbar/2$.

Action de S_+ : $S_+ |\downarrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle \quad S_+ |\uparrow\rangle = 0$

Action de S_- : $S_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle \quad S_- |\downarrow\rangle = 0$

Exercice 1 — Vérifier les commutateurs

78

Montrer que : $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$
en utilisant les matrices de Pauli.

Correction

$$[S_x, S_y] = \frac{\hbar^2}{4} [\sigma_x, \sigma_y]$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$$

$$\Rightarrow [S_x, S_y] = i\hbar S_z$$

Exercice 2 — Action sur les états

Calculer :

$$S_+ |\downarrow\rangle$$

$$S_- |\uparrow\rangle$$

$$S_+ |\uparrow\rangle$$

Correction

$$S_+ |\downarrow\rangle \in \hbar |\uparrow\rangle$$

$$S_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle$$

$$S_+ |\uparrow\rangle = 0$$

Exercice 3 — Valeurs propres de S_z

Montrer que les valeurs propres de S_z sont $\pm\hbar/2$.

Correction

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

Les valeurs propres sont immédiatement :
 $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$.

Exercice 4 — S^2

Montrer que :

$$S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbf{1}$$

Correction

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$$

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbf{1}$$

Donc :

$$S^2 = \frac{\hbar^2}{4} (1 + 1 + 1) \mathbf{1} = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbf{1}$$

Voir les solutions détaillées dans la diapositive suivante

Exo 1 solution détaillée :

Le spin est un **moment cinétique quantique**. Donc ses composantes S_x, S_y, S_z doivent obéir aux mêmes « règles de rotation » que le moment cinétique.

Ces règles de rotation sont :

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, [S_y, S_z] = i\hbar S_x, [S_z, S_x] = i\hbar S_y.$$

elles expriment que **les rotations dans l'espace ne commutent pas**.

Exemple :

- Si on tourne un livre de **90° autour de x**, puis de **90° autour de y**, on n'obtient pas la même orientation que si on fait les rotations dans l'autre ordre.

Le commutateur mesure **exactement** cette différence. Les matrices de Pauli, elles, sont construites comme **la plus petite représentation possible** qui réalise cette géométrie de rotation. C'est pour ça qu'en les utilisant, on retrouve automatiquement les bonnes relations du moment cinétique.

On part des matrices de Pauli: $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

Le spin physique est :

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$$

On doit calculer : $[S_x, S_y] = S_x S_y - S_y S_x$

On remplace S_x , S_y

80

$$S_x S_y = \left(\frac{\hbar}{2} \sigma_x \right) \left(\frac{\hbar}{2} \sigma_y \right) = \frac{\hbar^2}{4} \sigma_x \sigma_y$$

$$S_y S_x = \frac{\hbar^2}{4} \sigma_y \sigma_x$$

$$\text{Donc : } [S_x, S_y] = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x)$$

$$\text{Reste à calculer : } [\sigma_x, \sigma_y] = \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x.$$

Calcul du produit matriciel $\sigma_x \sigma_y$

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (0 \times 0 + 1 \times i) & (0 \times (-i) + 1 \times 0) \\ (1 \times 0 + 0 \times i) & (1 \times (-i) + 0 \times 0) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Donc :

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

Calcul de $\sigma_y \sigma_x$

$$\begin{aligned} \sigma_y \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (-i \times 1) & (0 \times 1) \\ (0 \times 1) & (i \times 1) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = -i \sigma_z \end{aligned}$$

Calcul du commutateur

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &= \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = i \sigma_z - (-i \sigma_z) \\ &= 2i \sigma_z \end{aligned}$$

On revient au spin physique

$$[S_x, S_y] = \frac{\hbar^2}{4} (2i \sigma_z) = i\hbar \left(\frac{\hbar}{2} \sigma_z \right) = i\hbar S_z$$

Finalement: $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$

C'est exactement la relation du moment cinétique.