Physique Quantique : Chapitre 1. :Théorie générale du moment cinétique

Mohammed EL Falaki

Master PM Rabat

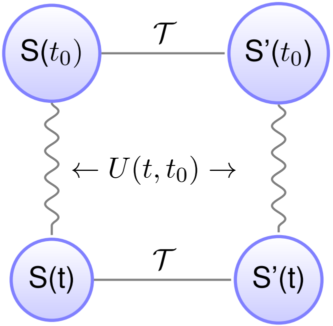
13 octobre 2024

Rappel : Postulats

- P1 : Description de l'état d'un système.
- P2 : Description des grandeurs physiques.
- P3 : Résultat d'une mesure.
- P4 : Décomposition spectrale.
- P5 : Réduction du paquet d'onde.
- P6 : Evolution dans le temps

Symétries en physique

En physique, une symétrie est une transformation ou une opération qui laisse un système inchangé ou qui préserve certaines propriétés du système.
Les symétries physiques sont essentielles pour comprendre et décrire le comportement des systèmes physiques, que ce soit en mécanique classique, en mécanique quantique, en électrodynamique, ou dans d'autres domaines de la physique.



- $\mathcal{T}$ est une transformation d'un état (S) vers un autre état (S') : Rotation des positions ou des vitesses d'un angle, dilatation des distances, changement de signe de charges. . ..
- $\mathcal{T}$ Une transformation de symétrie si $(S'(t))$ décrit un mouvement possible : système régi par les mêmes lois d'évolution que $(S(t_0))$.

Exemples

- Dilatation d'espace par un facteur n'est pas en général une transformation de symétrie.
- Translation ou rotation d'une quantité d'un système physique isolé est une opération de symétrie : Translation (espace, temps), rotation dans l'espace, Transformation de Lorentz. . .

Homogénéité de l'espace et conservation de la quantité de mouvement

homogénéité de l'espace

Toute translation dans l'espace d'un système isolé de particules doit laisser invariante la fonction énergie potentielle de ce système.

La translation dans l'espace d'un système de particules est une opération qui, à un moment donné t, déplace chaque particule du système depuis sa position initiale, $\vec{r}_i$, vers une nouvelle position $\vec{r}_i + \vec{\xi}$, en maintenant la même orientation et la même distance. Par conséquent, toute variation infinitésimale, notée dU, de l'énergie potentielle due à une translation infinitésimale, notée $d\vec{\xi}$, du système dans l'espace doit être nulle.

$$dU = \sum_i \frac{\partial U}{\partial \vec{r}_i} d\vec{r}_i = 0 \tag{1}$$

En utilisant le fait $\vec{F} = -\dfrac{d\vec{p}_i}{dt}$ et $d\vec{r}_i = d\vec{\xi}$, on a :

$$dU = \sum_i \frac{d\vec{p}_i}{dt} d\vec{\xi} = 0 \tag{2}$$

$$\Rightarrow \sum_i \frac{d\vec{p}_i}{dt} = 0$$

$\sum_i \vec{p}_i$ reste constante au cours du temps. Il s'agit de la somme des quantités de mouvement des particules, que l'on appelle quantité de mouvement du système, notée $\vec{p} = \sum_i \vec{p}_i$
Donc, la quantité de mouvement du système est conservée.

Statique

$$\psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})\xi(t)$$
$$H\varphi(\vec{r}) = E_n\varphi_n(\vec{r})$$

Orbitales atomiques, spectroscopie, Physique stat quantique

Dynamique

$$H\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)$$
$$\psi(\vec{r},t) = U(t)\psi(\vec{r},0)$$

Mouvement de Translation

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$$

Coordonnées cartésiennes (Particule dans une boite)

Mouvement de Rotation

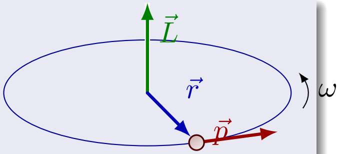
$$H = -\frac{\hbar^2}{2I}L^2 + V(\vec{r})$$

Cordonnées sphériques, polaires (Moment cinétique, spin,..)

Mouvement Harmonique

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + \frac{k}{2}V(\vec{r} - \vec{r_e q})$$

Systèmes de centre de



$\vec{F} = -\nabla V(r)$ est centrale et le moment cinétique est conservé :

$$\frac{d\vec{\ell}}{dt} = \vec{r} \wedge \vec{F} \ = 0.$$

on voit clairement que $\vec{\ell}$ est une constante du mouvement.

le moment cinétique classique noté $\vec{\ell}$ d'une particule caractérisée par le vecteur position $\vec{r}$ et le vecteur moment $\vec{p}$ est définie par :

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

$$\begin{cases} \ell_x = yp_z - zp_y \\ \ell_y = zp_x - xp_z \\ \ell_z = xp_y - yp_x \end{cases}$$

$$\ell_i = \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} x_j p_k$$

où ε_{ijk} est le symbole de

Principe de correspondance

$$\vec{r}(x, y, z) \quad \Longrightarrow \quad \vec{R}(X, Y, Z)$$

$$\vec{p}(p_x, p_y, p_z) \quad \Longrightarrow \quad \vec{P}(P_x, P_y, P_z)$$

R. Commutation

$$\begin{aligned} \left[R_\mu, P_\nu\right] &= i\hbar\delta_{\mu,\nu} \\ \left[R_\mu, R_\nu\right] &= 0 \\ \left[P_\mu, P_\nu\right] &= 0 \end{aligned}$$

$$\mu, \nu = x, y, z$$

Moment cinétique orbital quantique

$$\vec{L} = \vec{R} \wedge \vec{P} = \begin{cases} L_x = YP_z - ZP_y \\ L_y = ZP_x - XP_z \\ L_z = XP_y - YP_x \end{cases}$$

$$P_\mu \longleftrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial_\mu}, \quad \mu = x, yz$$

$$\vec{L} = \frac{\hbar}{i}\vec{R} \wedge \vec{\nabla}_r$$

$$\vec{\nabla}_r = \left(\frac{\partial}{\partial_x}, \frac{\partial}{\partial_y}, \frac{\partial}{\partial_z}\right)$$

$$L_i = \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} R_j P_k$$

$$\mu = x, y, z \longleftrightarrow i = 1, 2, 3$$

Propriétés

$$
\begin{aligned}
L_i^+ &= \varepsilon_{ijk}\left(R_j P_k\right)^+ \\
&= \varepsilon_{ijk} P_k R_j \\
&= -\varepsilon_{ikj} P_k R_j \\
&= -\left(\vec{P} \wedge \vec{R}\right)_i = L_i .
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
R.L = R_i L_i &= R_i \varepsilon_{ijk} R_j P_k \\
&= \varepsilon_{ijk} R_i R_j P_k \\
&\overset{i \leftrightarrows j}{=} \varepsilon_{jik} R_j R_i P_k \\
&= -\varepsilon_{ijk} R_j R_i P_k \\
&\Rightarrow R.L = 0.
\end{aligned}
$$

Relations de commutations

$$
\begin{aligned}
[R_i, L_j] &= \left[R_i, \sum_{kl} \varepsilon_{jkl} R_k P_l\right] \\
&= \sum_{kl} \varepsilon_{jkl} \left[R_i, R_k P_l\right] \\
&= \sum_{kl} \varepsilon_{jkl} \left(R_k \left[R_i, P_l\right]\right) \\
&= i\hbar \sum_{kl} \varepsilon_{jkl} R_k \delta_{il} \\
&:= i\hbar \varepsilon_{ijk} R_k
\end{aligned}
$$

Relations de commutations

$$
\begin{aligned}
[P_i, L_j] &= \left[P_i, \sum_{kl} \varepsilon_{jkl} R_k P_l\right] \\
&= \sum_{kl} \varepsilon_{jkl} \left[P_i, R_k P_l\right] \\
&= \sum_{kl} \varepsilon_{jkl} \left[P_i, R_k\right] P_l \\
&= -i\hbar \sum_{kl} \varepsilon_{jkl} P_l \delta_{ik} \\
&:= i\hbar \varepsilon_{ijl} P_l
\end{aligned}
$$

$\vec{R}$ et $\vec{P}$ sont des opérateurs vectoriels

Opérateurs vectoriels

$V(V_x, V_y, V_z)$ est un opérateur vectoriel si ses composantes se transforment comme les composantes d'un vecteur dans l'espace à trois dimensions :

$$A'_\mu = R_{\vec{u}}(\phi) V_\mu R^{+}_{\vec{u}}(\phi)$$

$$[L_i, V_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk} V_k$$

On peut vérifier

$$[L_i, U \wedge V] = i\hbar\varepsilon_{ijk}(U \wedge V)_k$$

Opérateur scalaire

un opérateur $A = (A_x, A_y, A_z)$ est dit scalaire s'il est invariant sous une rotation

$$[L_i, A_j] = 0$$

On peut vérifier

$$[L_i, U.V] = 0$$
$$[L_i, R.P] = 0$$
$$[L_i, R^2] = [L_i, P^2] = 0$$

Relations de commutations

$$\left[L_i, L_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$$
$$\left[L_i, L^2\right] = 0$$
$$\left[H, L^2\right] = 0$$
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(R)$$

Etats propres

$\left\{H, L^2, L_z\right\}$ est un ECOC $\rightarrow |n, \ell, m\rangle$ $\overrightarrow{vp}$ communs

$$L^2\,|n, \ell, m\rangle = \hbar^2\ell(\ell+1)\,|n, \ell, m\rangle$$
$$L_z\,|n, \ell, m\rangle = m\hbar\,|n, \ell, m\rangle$$
$$H\,|n, \ell, m\rangle = E_n\,|n, \ell, m\rangle$$

Définition

Moment cinétique $\vec{J}$ tout ensemble de trois observables J_x, J_y, J_z vérifiant les relations de commutation suivantes :

$$\left[J_i, J_j\right] = \imath\hbar\varepsilon_{ijk}J_k, \quad i,j,k = (x,y,z)$$

Propriétés

- J^2 est un opérateur scalaire $\left[J_i, J^2\right] = 0$
- $\left[J_x, \left[J_y, J_z\right]\right] + \left[J_y, \left[J_z, J_x\right]\right] + \left[J_z, \left[J_x, J_y\right]\right] = 0$

Opérateurs d'échelles

$$J_\pm = J_x \pm \imath J_y$$
$$J_\pm^+ = J_\mp$$

Relations importantes

$$\left[J_z, J_\pm\right] = \pm\hbar J_\pm$$
$$\left[J_+, J_-\right] = 2\hbar J_z$$
$$\left[J^2, J_\pm\right] = 0 = \left[J^2, J_z\right]$$

$$\begin{aligned} J_+J_- &= J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z \\ &= J^2 - J_z(J_z - \hbar) \\ J_-J_+ &= J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z \\ &= J^2 - J_z(J_z + \hbar) \\ J^2 &= \frac{1}{2}\left(J_+J_- + J_-J_+\right) + J_z^2 \end{aligned}$$

Vecteurs propres et valeurs propres de J^2 etJ_z

$\{J^2, J_z\}$ est un ECOC, on note par $|j, m\rangle$ les états propres communs de J^2 et J_z associés respectivement aux valeurs propres $\lambda\hbar^2$ et $m\hbar$:

$$J^2 \, |j, m\rangle = \lambda_j \hbar^2 \, |j, m\rangle \quad \lambda_j \in \mathbb{R}$$
$$J_z \, |j, m\rangle = m\hbar \, |j, m\rangle \quad m \in \mathbb{R}$$
$$\mathcal{E}_{j,m} = \{|j, m\rangle\}, \quad dim\mathcal{E}_{j,m} = ?$$

Proposition

- $J_\pm \, |j, m\rangle$ est un vecteur propre de J^2 associé à la valeur propre $\hbar^2\lambda_j$.
- $J_\pm \, |j, m\rangle$ est un vecteur propre de J_z associées la valeur propre $(m \pm 1)\hbar \Longrightarrow J_\pm \, |j, m\rangle \in \mathcal{E}_{j,m\pm1}$,

$$\Longrightarrow J_\pm \, |j, m\rangle \; = C_{j,m\pm} J_\pm \, |j, m \pm 1\rangle$$

Proposition

1. L'opérateur J^2 est définit positif,$\Longrightarrow \lambda_j \geq 0$.

$$\begin{aligned} \langle\psi| J^2 |\psi\rangle &= \langle\psi| J_x^2 |\psi\rangle + \langle\psi| J_y^2 |\psi\rangle + \langle\psi| J_z^2 |\psi\rangle \\ &= \|J_x |\psi\rangle\|^2 + \|J_y |\psi\rangle\|^2 + \|J_z |\psi\rangle\|^2 \\ &= \lambda_j \langle\psi|\psi\rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Proposition

- $0 \leq m^2 \leq \lambda \Longrightarrow (m_{min} = -\lambda_j) \leq m \leq (m_{max} = \lambda_j)$.

$$\begin{aligned} \langle j,m| J^2 |j,m\rangle &= \langle j,m| J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 |j,m\rangle \\ \langle j,m| J^2 |j,m\rangle &\geq \langle j,m| J_z^2 |j,m\rangle \\ \lambda\langle j,m|j,m\rangle &\geq m^2\langle j,m|j,m\rangle \\ \lambda &\geq m^2 \end{aligned}$$

expression de λ_j :

$$\begin{aligned}
J^2 \left|j,m\right\rangle &= \hbar^2 \lambda_j \left|j,m\right\rangle \\
J_z \left|j,m\right\rangle &= \hbar m \left|j,m\right\rangle . \\
J_+ \left|j,m_{max}\right\rangle &= 0 \\
{\color{red}J_-} \left(J_+ \left|j,m_{max}\right\rangle\right) &= 0 = \left(J^2 - J_z^2 - \hbar J_z\right) \left|j,m_{max}\right\rangle \\
&= \hbar^2 \left(\lambda_j - m_{max}^2 - m_{max}\right) \left|j,m_{max}\right\rangle = 0 \\
&\Rightarrow \lambda_j - m_{max}^2 - m_{max} = 0 \\
&\Rightarrow \lambda_j = m_{max}\left(m_{max} + 1\right) \\
&\boxed{\lambda_j = j\left(j+1\right)} \quad \boxed{-j \leq m \leq j}
\end{aligned}$$

Proposition

Les valeurs possibles de j sont des entiers ou demi-entier :

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$$

$$J_\pm \left|j,m\right\rangle \propto \left|j,m\pm 1\right\rangle \in \mathcal{E}_{j,m\pm 1}$$
$$J_\pm^2 \left|j,m\right\rangle \propto \left|j,m\pm 2\right\rangle \in \mathcal{E}_{j,m\pm 2}$$
$$\vdots$$
$$J_\pm^p \left|j,m\right\rangle \propto \left|j,m\pm p\right\rangle \in \mathcal{E}_{j,m\pm p}$$
$$\vdots$$
$$\vdots$$

$\exists p_0 \in \mathbb{N}$ tque

$$J_+^{p_0} \left|j,m\right\rangle =\propto \left|j,m+p_0\right\rangle \neq 0$$

et $J_+^{p_0+1} \left|j,m\right\rangle \propto \left|j,m+p_0+1\right\rangle = 0$

$\exists q_0 \in \mathbb{N}$ tque

$$J_-^{q_0} \left|j,m\right\rangle =\propto \left|j,m-q_0\right\rangle \neq 0$$

et $J_-^{q_0+1} \left|j,m\right\rangle \propto \left|j,m-q_0-1\right\rangle = 0$

$\exists p_0 \in \mathbb{N}$ tque

$$J_+^{p_0} \, |j, m\rangle = \propto |j, m + p_0\rangle \neq 0$$

$$\begin{cases} m + p_0 & = j \quad (1) \\ m - q_0 & = -j \quad (2) \end{cases}$$

$$J_+^{p_0+1} \, |j, m\rangle \propto |j, m + p_0 + 1\rangle \; = 0$$

$$(1) - (2) \Rightarrow j = \frac{p_0 + q_0}{2} = \frac{n_0}{2}$$

$\exists q_0 \in \mathbb{N}$ tque

avec

$$J_-^{q_0} \, |j, m\rangle = \propto |j, m - q_0\rangle \neq 0$$

$$n_0 \in \mathbb{N}$$

$$J_-^{q_0+1} \, |j, m\rangle \propto |j, m - q_0 - 1\rangle \; = 0$$

$$j = 0, \frac{1}{2}, \frac{2}{2}, \frac{3}{2}, \ldots$$

Normalisation

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

où $C_{j,m\pm}$ sont des constantes déterminées en normalisant les états $J_{\pm}\,|j,m\rangle$.

$$\begin{aligned}
\left\|J_{\pm}\,|j,m\rangle\right\|^2 &= \left\|C_{j,m\pm}\,|j,m\pm 1\rangle\right\|^2 \\
\langle j,m|\,J_{\mp}J_{\pm} + |j,m\rangle &= \left\|C_{j,m\pm}\right\|^2 \underbrace{\langle j,m\pm 1|j,m\pm 1\rangle}_{=1} \\
\Rightarrow \left\|C_{j,m\pm}\right\|^2 &= \langle j,m|\,J_{\mp}J_{\pm}\,|j,m\rangle \\
&= \langle j,m|\,J^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z\,|j,m\rangle \\
&= \left(j(j+1) - m(m\pm 1)\right)\hbar^2
\end{aligned}$$

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

Remarques

1. m et j sont des nombres quantiques : j est le nombre quantique azimutal ou secondaire ; m le nombre quantique magnétique ou tertiaire.
2. A j fixé, l'ensemble $\mathcal{E}_j = \{|j, m\rangle\}$ s'appelle un multiplet, $dim\mathcal{E}_j = 2j + 1$.
   - $j = 0 \Rightarrow m = 0$: $|0, 0\rangle$ est un singulet.
   - $j = 1/2 \Rightarrow m = \pm 1/2$: $|1/2, \pm 1/2\rangle$ est un doublet.
   - $j = 1 \Rightarrow m = \pm 1, 0$: $|1, m\rangle$ est un triplet.
3. le moment cinétique est orienté suivant l'axe de quantification :

$$\langle j, m| \, J_+ J_- \, |j, m\rangle = 0 \Rightarrow \langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0 \Rightarrow \left\langle \vec{J} \right\rangle = m\hbar\vec{e}_z$$

.

Résumé

1. $$[J_i, J_j] = \imath\hbar\varepsilon_{ijk}J_k, \quad i,j,k = (x,y,z).$$

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

3. les seules valeurs possibles de j sont :
$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$$

4. pour une valeur fixée de j, les seules valeurs possible de m sont :
$$m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j.$$

$\{H, L^2, L_z\}$ est un ECOC $\Rightarrow$ une base de vecteurs propres communs $\{|n, \ell, m\rangle\} := \{|\ell, m\rangle\}$:

$$\begin{aligned} L^2 \, |\ell, m\rangle &= \ell(\ell+1)\hbar^2 \, |\ell, m\rangle \\ L_z \, |\ell, m\rangle &= m\hbar \, |\ell, m\rangle \end{aligned}$$

En représentation $|\vec{r}\rangle$, les fonctions propres associées

$$\psi_{\ell,m}(r,\theta,\varphi) \; := \; \langle \vec{r} | \ell, m\rangle = R_{\ell(r)} Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

doivent vérifier :

$$-\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right] + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \ell(\ell+1) Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi} Y_\ell^m(\theta,\varphi) \; = m Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

avec

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi \; = \; 1$$

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_\ell^m(\theta,\varphi) = mY_\ell^m(\theta,\varphi)$$

Solution :

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = A_\ell^m(\theta)e^{im\varphi}$$

Le système est invariant sous une rotation de 2π :

$$Y(\theta,\varphi+2\pi) = Y(\theta,\varphi)$$

$$\Rightarrow e^{2im\pi} = 1 \Longrightarrow m \text{ est un entier}$$

puisque $m-\ell = p_0$ est un entier donc ℓ est un entier

$$\Rightarrow \begin{cases} \ell = 0,1,2,\dots \\ -\ell \leq m \leq +\ell \end{cases}$$

$$L_-Y_\ell^m(\theta,\varphi)=\hbar\sqrt{(\ell(\ell+1)-m(m-1))}Y_\ell^{m+1}(\theta,\varphi)$$

En particulier

$$L_-Y_\ell^{-\ell}(\theta,\varphi)=0$$

on a

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

donc

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)A_\ell^{-\ell}(\theta)e^{-i\ell\varphi}=0$$

soit

$$\frac{d(A_\ell^{-\ell}(\theta))}{d\theta} \quad = \quad \ell\cot\theta A_\ell^{-\ell}(\theta)$$

$$A_\ell^{-\ell}(\theta))=c_\ell(\sin^\ell\theta)$$