Chapter 1

Applications des postulats de la Mécanique Quantique

1.1 Spin $1/2$: une (très) brève introduction à la quantification du moment angulaire

En mécanique classique, le moment angulaire est une des grandeurs très importantes associeés au mouvement et a suscité une grande étude, en tant que **constante du mouvement**. Il paraît dès lors naturel de partir à la recherche de son équivalent en mécanique quantique, et le chapitre 4 (**insérer référence**) a permis, à travers l'expérience de Stern-Gerlach, de mettre en évidence un **moment cinétique intrinsèque**, par exemple pour l'électron, une grandeur qui n'apparaît qu'à l'échelle quantique et qui n'a aucun équivalent classique.

Nous souhaitons donc, avec une étude **quantique** du moment cinétique, obtenir :

- Des **opérateurs** de moment cinétique correspondant aux **grandeurs** classiques
- L'invariance par rotation en mécanique quantique
- Les **valeurs propres** des opérateurs obtenus au premier point, car le spectre d'une observable correspondant aux mesures possibles, cela nous donnera les valeurs que peut prendre le moment cinétique d'une particule.

Dans cette section, l'étude du moment cinétique est organisé en trois parties :

1. Le lien avec les rotations : introduction au groupe des rotations ;
2. L'invariance par rotation et la quantification du moment angulaire ;

3. Application : représentation du groupe des rotations en 2D par les matrices de Pauli, et mise en avant des vecteurs propres.

Remarque sur les moments cinétiques en mécanique quantique Nous commencerons cette section en discutant de l'équivalent quantique du moment cinétique classique **L**, et nous enchaînerons ensuite sur une description générale du moment cinétique **total** d'une particule en mécanique quantique, qu'on note **J**, composé :

- du moment cinétique angulaire (aussi appelé "moment cinétique orbital") **L**, dû au mouvement de la particule (par exemple, dans un potentiel central comme en mécanique classique) ;
- et du moment cinétique intrinsèque (ou "moment cinétique de spin"), noté **S**, celui intervenant dans l'expérience de Stern-Gerlach et n'ayant aucun équivalent classique.

1.1.1 Le groupe des rotations

Le titre de cette section mène à la définition des deux notions suivantes :

Définition 1.1.1. *Un groupe G est un ensemble d'élements, muni d'une opération ("opération de groupe", ou "loi de composition") notée "$\cdot$" qui satisfait les propriétés suivantes :*

- *Le produit est interne :* $\forall g_1, g_2 \in G : g_1 \cdot g_2 \in G$
- *Le produit est associatif :* $\forall g_1, g_2, g_3 \in G : g_1 \cdot (g_2 \cdot g_3) = (g_1 \cdot g_2) \cdot g_3$.
- *Existence d'un élément neutre :* $\exists e \in G \; t.q \; \forall g \in G \; : \; e \cdot g = g = g \cdot e$.
- *Existence d'un inverse pour tout élément du groupe :* $\forall g \in G \; , \; \exists g^{-1} \in G \; t.q \; g^{-1} \cdot g = e = g \cdot g^{-1}$.

Définition 1.1.2. *(Issue du Cohen-Tannoudji, ch. VI) Une rotation géométrique est une* ***transformation*** *dans l'espace tridimensionnel qui conserve un point, les angles, les distances ainsi que le sens des trièdres*[1].

Les rotations sont d'une importance particulière en physique, car de nombreux objets, pas seulement les vecteurs de l'espace tridimensionnel, se transforment sous l'action d'une rotation. Ainsi, nous généralisons la notion de rotation à l'appartenance à un groupe, le **groupe des rotations**.

Le groupe des rotations, noté $SO(3)$ sera amplement étudié dans les cours de maths, et de mécanique quantique de BA3, mais nous pouvons intuitivement accepter que les rotations constituent en effet un groupe, de par leur loi de composition interne et associative, l'existence d'un neutre (la rotation identité) et

[1] Pour exclure les symétries du plan

d'une rotation inverse.

Pour le formaliser, il reste à insister sur la conservation de la norme. Ainsi, les rotations seront généralisées à des "éléments du groupe des rotations", et les éléments de ce groupe pourront être représentés par des matrices **orthogonales**. Prenons le cas classique et nous obtenons des matrices orthogonales 3×3.

$$R \in \mathbb{R}^{3\times 3} \quad | \quad R^T R = \mathbb{I}$$

Une rotation est paramétrée par

- $\vec{n}$, l'axe de rotation (vecteur unitaire);
- θ, l'angle de rotation.

On note $R(\theta, \vec{n})$ la rotation (dans le sens antihorlogique) autour de l'axe $\vec{n}$, d'un angle θ. Dans l'espace tridimensionnel, $\vec{n} \in \mathbb{R}^3$, et nous avons les matrices suivantes, bien connues, implémentant les rotations autour des trois axes usuels. Elles peuvent être notées d'une autre manière, introduisant les matrices L_x, L_y, L_z (qui auront une importance particulière par la suite).

$$R(\theta, \vec{1}_x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} = \exp(i\theta L_x), \quad L_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}$$

$$R(\theta, \vec{1}_y) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} = \exp(i\theta L_y), \quad L_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$R(\theta, \vec{1}_z) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \exp(i\theta L_z), \quad L_z = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

D'une manière générale, nous pouvons écrire

$$R(\theta, \vec{n}) = \exp\Big(i\theta\vec{n} \cdot \vec{L}\Big) \qquad \text{où } \vec{n} \cdot \vec{L} = n_x L_x + n_y L_y + n_z L_z\ . \tag{1.1}$$

$$= \mathbb{I} + i\theta\vec{n} \cdot \vec{L} + O(\theta^2) \tag{1.2}$$

L'introduction de ces opérateurs L_i est très intéressante car en théorie des groupes, lorsque nous pouvons écrire 1.2, nous disons que les opérateurs L_x, L_y, L_z sont les **générateurs du groupe des rotations**. L'interprétation en est facile

: prenons par exemple une rotation autour de l'axe $\vec{1}_x$ d'un angle infinitésimal $\mathrm{d}\theta$.

$$R(\mathrm{d}\theta, \vec{1}_x) = \mathbb{I} + iL_x\, \mathrm{d}\theta \qquad \text{au premier ordre}$$

La rotation diffère de l'opérateur identité d'un facteur $\mathrm{d}\theta$ au coefficient L_x au premier ordre. L_x est alors dit un "générateur infinitésimal", et en théorie des groupes, dans un groupe de Lie [2], l'étude des générateurs infinitésimaux suffit à reconstruire tout le groupe.

Relations de commutation du groupe des rotations : algèbre du groupe

Les relations de commutation sont centrales dans tout groupe. Ici, avec les générateurs que nous avons introduits, nous pouvons mettre en avant les relations de commutation suivantes :

$$\begin{array}{ll} [L_x, L_y] & = iL_z \\ [L_z, L_x] & = iL_y \\ [L_y, L_z] & = iL_x \end{array} \quad ,$$

ou, de manière abrégée :

$$\boxed{[L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk} L_k} \,. \tag{1.3}$$

Les relations de commutation 1.3 définissent l'**algèbre de Lie** du groupe $SO(3)$[3].

Interprétation des relations de commutation je ne réussis pas à obtenir les mêmes termes, et je ne comprends pas l'interprétation. J'ai trouvé un équivalent en mécanique classique dans le Cohen-Tannoudji.

$$\begin{array}{lll} R(-\theta, y)R(-\theta, x)R(\theta, y)R(\theta, x) & = \mathbb{I} + \theta^2\,[L_x, L_y] + O(\theta^3) & \\ & = R(\theta^2, L_z) & \text{à l'ordre } \theta^2 \end{array}$$

1.1.2 Représentations du groupe des rotations

Nous avons vu à la section précédente l'action d'une rotation sur l'espace euclidien tridimensionnel. Seulement, comme déjà mentionné, en physique, les vecteurs ne sont pas les seuls objets pouvant se transformer par une rotation : c'est ce qui motive l'utilisation du groupe des rotations en général plutôt que les matrices $R \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ qui représentent les rotations dans l'espace.

Ainsi, de manière générale, le groupe des rotations aura plusieurs représentations, l'important étant de retrouver les relations de commutation 1.3.

[2] Voir définition dans le cours de maths

[3] Ou de manière équivalente, l'algèbre de commutation des générateurs infinitésimaux du groupe.

Définition 1.1.3. *Une représentation de l'algèbre de Lie du groupe des rotations est un ensemble de matrices J_i, de taille $n \times n$ a priori arbitraire, satisfaisant les relations de commutation*

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k$$

En mécanique quantique, une représentation de $SO(3)$ permet d'implémenter les transformations de rotation de la manière suivante :

$$|\psi\rangle \overset{R(\theta,\vec{n})}{\longrightarrow} \exp\Big(i\theta\ \vec{n}\cdot\vec{J}\Big)\,|\psi\rangle \tag{1.4}$$

Un exemple de représentation est l'équivalent quantique du moment angulaire $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$:

$$\begin{aligned} J_x &= yP_z - zP_y \\ J_y &= zP_x - xP_z \\ J_z &= xP_y - yP_x \end{aligned}$$

> *Cette section a servi à introduire le* ***groupe des rotations*** *: la notion de groupe, de générateur, de représentation. Grâce à cela, nous aboutissons à une définition très générale des opérateurs qui implémentent une transformation de rotation.*
>
> A présent, nous allons utiliser le formalisme introduit, principalement les relations de commutation, pour étudier davantage les rotations en mécanique quantique.

1.1.3 Invariance par rotation

Un système physique S est par définition **invariant par rotation** si en lui appliquant à un moment donné une rotation quelconque $\mathcal{R}$ et que nous appliquons la même rotation à tous les systèmes ou appareils qui peuvent influer sur lui, ses propriétés et son comportement ne sont pas modifiés.

En particulier, l'invariance par rotation en mécanique quantique veut dire entre autres que l'évolution d'un système se déroule de la même manière que s'il avait préalablement été sujet à une rotation. En pratique :

- L'évolution dans le temps est décrite par l'équation de Schrödinger, et indique que $|\psi(t)\rangle = e^{-it\ H}$
- Une rotation est générée par le moment cinétique du système, $\vec{J}$:

$$R(\theta,\vec{n})\,|\psi\rangle = e^{i\theta\ \vec{n}\cdot\vec{J}}\,|\psi\rangle$$

Ainsi, en mécanique quantique, un système est invariant par rotation si

$$\underbrace{e^{-it\ H}}_{\text{Evol. temps}}\ \underbrace{e^{i\theta\ \vec{n}\cdot\vec{J}}}_{\text{Rotation}}\ |\psi\rangle = e^{i\theta\ \vec{n}\cdot\vec{J}}\ e^{-it\ H}\ |\psi\rangle \qquad \forall\ |\psi\rangle\,, \vec{n}, \theta, t$$

Et cette condition doit être vraie pour tout θ et t, que l'on peut peut prendre arbitrairement petits, pour obtenir la condition

$$[H, J_x] = [H, J_y] = [H, J_z] = 0 \tag{1.5}$$

Je ne suis pas sûr du calcul qui mène à cela. J'arrive à $[H, J_x]+[H, J_y]+[H, J_z] = 0$ et je ne vois pas comment affirmer la condition ci-dessus

Qui correspond à une traduction de l'invariance par rotation : il faut et suffit que H commute avec les opérateurs de rotations infinitésimales, qui correspondent aux trois composantes du moment cinétique total $\vec{J}$ du système.

Conséquences de l'invariance par rotation

L'invariance par rotation implique la **conservation du moment angulaire**. Montrons-le en deux temps :

1. Si $|\psi(t)\rangle$ est solution de l'équation de Schrödinger $i\partial_t |\psi\rangle = H|\psi\rangle$, alors

$$\begin{aligned} \langle\psi(t)| J_x |\psi(t)\rangle &= \langle\psi(0)| e^{it\,H} J_x e^{-it\,H} |\psi(0)\rangle \\ &= \langle\psi(0)| J_x |\psi(0)\rangle \end{aligned}$$

   Etant donné que J_x et $e^{\pm it\,H}$ commutent (vu que H et J_x commutent) je ne suis pas sûr de cette justification. La relation que nous venons d'obtenir montre que si J_x est une observable, sa valeur moyenne dans l'état ψ est constante à travers le temps.

2. Si $|\psi\rangle$ est vecteur propre de J_x :

$$J_x |\psi\rangle = j |\psi\rangle$$

   Alors, $|\psi(t)\rangle = \exp(-it\,H)|\psi\rangle$ est aussi un vecteur propre de J_x, avec la même valeur propre :

$$\begin{aligned} J_x |\psi(t)\rangle &= J_x e^{-it\,H} |\psi\rangle \\ &= e^{-it\,H} J_x |\psi\rangle \\ &= e^{-it\,H} j |\psi\rangle \\ &= j e^{-it\,H} |\psi\rangle \\ &= j |\psi(t)\rangle \end{aligned}$$

   Ce dernier résultat est important car les valeurs propres et les états propres d'une observable sont les résultats et les états possibles après une mesure de la grandeur physique correspondant à cette observable. Ici, en prouvant ce point, nous prouvons que l'évolution dans le temps n'impacte pas la mesure du moment angulaire de la particule.

Ces deux conséquences immédiates montrent que la **grandeur conservée** par l'**invariance par rotation** est le **moment angulaire** (ses trois composantes).

1.1.4 Quantification du moment angulaire

Le résultat dont nous allons discuter dans cette section est une **quantification du moment angulaire**, comme nous avions eu quantification de l'énergie dans des problèmes précédents. Concrètement, la structure de groupe, par exemple la relation de commutation

$$[J_x, J_y] = iJ_z$$

impose en réalité des conditions sur les valeurs propres de l'observable J_z.

Théorème 1.1.4. *Les relations de commutation $[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk}J_k$ impliquent que les valeurs propres de J_k sont* ***demi-entières*** *:*

$$J_k |\psi\rangle = m |\psi\rangle \quad \Rightarrow \; m = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$$

Ce résultat sera prouvé dans le cours de BA3.

1.1.5 Exemple de représentation – Matrices de Pauli

En introduisant le groupe des rotations, nous avons introduit la définition d'une représentation de ce groupe : un ensemble de matrices satisfaisant les relations de commutation 1.3. Ici, nous présentons un exemple de représentation avec des matrices 2×2 : les **matrices de Pauli**.

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

$$J_x = \frac{1}{2}\sigma_x \qquad J_y = \frac{1}{2}\sigma_y \qquad J_z = \frac{1}{2}\sigma_z$$

Nous pouvons vérifier les relations de commutation (notamment en vérifiant que $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$), et d'autres relations :

- $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}\mathbb{I}$
- $\mathrm{Tr}(\sigma_i) = 0 \forall i$
- $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\mathbb{I} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$

Valeurs propres et vecteurs propres des J_i