

Chapitre 12

Formalisme du spin $1/2$, résonance magnétique

Il faut que l'objet soit sortable.

Charles Perrault, Les canes et le petit barbet

La genèse du concept de spin a probablement été la plus compliquée de toute la physique quantique du premier quart de siècle. De fait, après le triomphe du modèle de Bohr en 1913, la « vieille théorie des quanta » de Bohr et Sommerfeld, fondée sur l'idée de restrictions quantiques pour les grandeurs classiques, accumulait les succès et voulait tendre vers une explication unifiée des données spectroscopiques. Hélas, le catalogue des recettes *ad hoc* de plus en plus compliquées pouvait apparaître comme une forme savante de l'ignorance, et il était encore plus préoccupant de voir l'accumulation des succès se doubler d'une accumulation égale de faits inexplicables, voire de paradoxes. L'effet Zeeman anormal, le clivage des raies spectrales, les couches électroniques des atomes complexes, l'expérience de Stern et Gerlach, etc., semblaient être de véritables défis lancés à la communauté scientifique et personne ne devinait que ces phénomènes avaient une origine commune.

Car l'explication était simple. Mais elle était révolutionnaire. Pour la première fois apparaissait une grandeur purement quantique, sans aucun analogue classique. Et cette grandeur, le spin $1/2$, conditionne tout le monde physique.

Nous avons déjà évoqué les arguments expérimentaux qui montrent l'existence dans la nature de moments cinétiques demi-entiers. La physique atomique montre qu'il n'est pas possible de rendre compte des effets observés si l'on admet que l'électron, particule *ponctuelle* (jusqu'à des distances de 10^{-18} m), n'a que les trois degrés de liberté de translation dans l'espace que nous avons considérés jusqu'à présent. Une quantité d'observations expérimentales et d'arguments théoriques font admettre l'existence d'un degré de liberté *interne* pour l'électron : son *moment cinétique propre*. C'est une grandeur sans analogue classique : toute modélisation de ce moment cinétique propre sous forme d'un rotateur rigide est impossible. Autrement dit, l'électron, particule



FIG. 12.1: Trois physiciens discutant la manière optimale de mettre en évidence des effets de spin dans les collisions de protons à l'accélérateur d'Argonne (U.S.A.) (Photo CERN).

ponctuelle, « tourne » sur lui-même. Cette « rotation » est purement quantique.

Nous nous référons souvent au cas de l'électron, mais cette étude s'étend immédiatement à d'autres particules ou systèmes. D'autres particules élémentaires (le proton et le neutron par exemple) ont le même moment cinétique propre que l'électron. En mécanique quantique relativiste, la structure du groupe de Lorentz fait apparaître le moment cinétique propre de toute particule comme un attribut de cette particule, qui la définit au même titre que sa charge électrique et sa masse.

Nous nous intéressons ici au cas du spin 1/2, c'est-à-dire à un moment cinétique propre correspondant à des valeurs propres $j = 1/2, m = \pm 1/2$. De façon générale, on nomme *spin* d'une particule son moment cinétique *propre* ou *intrinsèque* par opposition à son moment cinétique orbital; le spin peut alors prendre toute la série des valeurs vues au chapitre 10 ($j = 0$ pour le méson π , $j = 1$ pour le photon ou le deutéron, $j = 3/2$ pour certaines particules élémentaires et certains noyaux, etc.).

Notre ambition principale est de nous familiariser avec le concept du spin 1/2. Il s'agit d'une grandeur véritablement quantique, et la représentation que chacun se fabrique pour ce concept est une affaire personnelle, comme le montre la figure 12.1. Nous reviendrons ensuite sur la relation entre moment cinétique et moment magnétique, pour aboutir, dans le dernier paragraphe, à un phénomène d'une grande importance pratique, la résonance magnétique.

L'hypothèse du spin de l'électron est due à Uhlenbeck et Goudsmit en 1925. Ils étaient tous deux très jeunes, puisque Uhlenbeck hésitait entre une carrière en physique et un poste d'historien, et Goudsmit n'avait pas encore passé son examen final. Dès qu'ils réalisent que leur hypothèse permet d'expliquer de nombreux faits expérimentaux alors incompris, ils en discutent avec leur professeur, P. Ehrenfest, qui les encourage à publier leur travail. Leur idée est reçue avec des sentiments très divers par la communauté physicienne. Bohr est très enthousiaste, alors que Pauli et Lorentz soulèvent de sérieuses objections. L'une d'entre elles est liée à la relativité. Si on modélise l'électron par une sphère dont l'énergie électrostatique est égale à son énergie de masse $m_e c^2$, on trouve un rayon de l'ordre de $e^2/(m_e c^2)$ et la vitesse

équatoriale de la sphère doit alors être beaucoup plus grande que la vitesse de la lumière pour assurer un moment cinétique égal à $\hbar/2$ (on obtient en fait $v_{\text{eq}} \sim c/\alpha = 137c$). Heureusement, on sait maintenant que cette objection n'est pas pertinente ; c'est simplement un argument parmi d'autres, qui montrent qu'une représentation classique du moment cinétique intrinsèque de l'électron est impossible. Le spin est un concept entièrement quantique.

1 Espace de Hilbert du spin 1/2

Le degré de liberté associé au moment cinétique propre d'une particule se manifeste expérimentalement par l'existence des grandeurs physiques que sont les projections sur trois axes x, y, z de ce moment cinétique, ainsi que toute fonction de ces trois grandeurs. La propriété fondamentale d'une particule de spin 1/2 est que lors de la mesure de la projection de son moment cinétique propre, dorénavant appelé spin, suivant un axe quelconque, les seules modalités observées sont les deux valeurs $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$.

De ce résultat expérimental découle le fait qu'en mesurant le carré de n'importe quelle composante du spin, on ne trouve qu'une seule valeur $\hbar^2/4$, avec probabilité un. Par conséquent, la mesure du carré du spin $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ donne le résultat $S^2 = 3\hbar^2/4$, quel que soit l'état de spin de la particule. Tout état de spin est superposition linéaire de deux états de base et le degré de liberté de spin se décrit dans un espace de Hilbert à *deux dimensions* : $\mathcal{E}_{\text{spin}}$.

1.1 Observables de spin

Soit $\hat{\mathbf{S}}$ l'observable vectorielle spin, c'est-à-dire un ensemble de trois observables $\{\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z\}$. Ces trois observables ont les relations de commutation d'un moment cinétique :

$$\hat{\mathbf{S}} \times \hat{\mathbf{S}} = i\hbar \hat{\mathbf{S}} \quad . \quad (12.1)$$

Chacune des observables \hat{S}_x, \hat{S}_y et \hat{S}_z a pour valeurs propres $\pm\hbar/2$. L'observable $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ est proportionnelle à l'identité dans $\mathcal{E}_{\text{spin}}$ avec pour valeur propre $3\hbar^2/4$.

1.2 Représentation dans une base particulière

Choisissons une base d'états où \hat{S}^2 et \hat{S}_z sont diagonaux, que nous notons $\{|+\rangle, |-\rangle\}$:

$$\hat{S}_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle \quad \hat{S}_z|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle \quad \hat{S}^2|\pm\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}|\pm\rangle \quad . \quad (12.2)$$

Dans la notation du chapitre 10, les états $|\pm\rangle$ seraient $|j = 1/2, m = \pm 1/2\rangle$. L'action de \hat{S}_x et \hat{S}_y sur les éléments de cette base s'écrit (voir Eq. (10.17)) :

$$\hat{S}_x|+\rangle = \hbar/2|-\rangle \quad \hat{S}_x|-\rangle = \hbar/2|+\rangle \quad (12.3)$$

$$\hat{S}_y|+\rangle = i\hbar/2|-\rangle \quad \hat{S}_y|-\rangle = -i\hbar/2|+\rangle \quad (12.4)$$

Un état de spin quelconque $|\Sigma\rangle$ s'écrit :

$$|\Sigma\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (12.5)$$

Les probabilités de trouver $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$ dans une mesure de S_z sur cet état sont $P(+\hbar/2) = |\alpha_+|^2$, $P(-\hbar/2) = |\alpha_-|^2$.

1.3 Représentation matricielle

Il est commode d'utiliser une représentation matricielle pour les vecteurs d'état et les observables ci-dessus :

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad |\Sigma\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \quad (12.6)$$

Nous pouvons utiliser les matrices de Pauli $\hat{\sigma} \equiv \{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$, introduites au chapitre 6 :

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (12.7)$$

qui satisfont aux relations de commutation :

$$\hat{\sigma} \times \hat{\sigma} = 2i \hat{\sigma} \quad (12.8)$$

Les observables de spin s'écrivent de la façon suivante :

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \quad (12.9)$$

Dans cette base, les états propres $|\pm\rangle_x$ de \hat{S}_x et $|\pm\rangle_y$ de \hat{S}_y sont :

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \quad |\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \quad (12.10)$$

1.4 Etat de spin quelconque

Considérons l'état de spin le plus général $|\Sigma\rangle$. A un facteur de phase global près sans importance physique, cet état peut toujours s'écrire :

$$|\Sigma\rangle = e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) |+\rangle + e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2) |-\rangle ,$$

où $0 \leq \theta \leq \pi$ et $0 \leq \varphi < 2\pi$. Il est alors simple de vérifier que $|\Sigma\rangle$ est état propre avec la valeur propre $\hbar/2$ de l'opérateur $\hat{S}_{\mathbf{u}} = \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{S}}$, projection du spin sur l'axe de vecteur unitaire \mathbf{u} , d'angle polaire θ et d'azimut φ . On a en effet :

$$\mathbf{u} = \sin \theta \cos \varphi \mathbf{u}_x + \sin \theta \sin \varphi \mathbf{u}_y + \cos \theta \mathbf{u}_z \quad ,$$

soit, en notation matricielle :

$$\hat{S}_{\mathbf{u}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad .$$

Autrement dit, pour tout état $|\Sigma\rangle$ d'un spin 1/2, il existe un vecteur \mathbf{u} tel que $|\Sigma\rangle$ est état propre de l'opérateur $\mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{S}}$, correspondant à la projection du spin sur la direction \mathbf{u} . Cette propriété remarquable ne se généralise pas à un spin plus élevé.

2 Description complète d'une particule de spin 1/2

Ce que nous venons de faire est parfaitement semblable à l'analyse phénoménologique du moment magnétique du chapitre 8. L'état spatial d'une particule de spin 1/2 dans l'espace à trois dimensions se décrit dans l'espace de Hilbert $\mathcal{E}_{\text{externe}}$ des fonctions de carré sommable sur l'espace à trois dimensions $\mathcal{L}^2(R^3)$, l'état de spin dans $\mathcal{E}_{\text{spin}}$ introduit ci-dessus.

2.1 Espace de Hilbert

L'espace de Hilbert complet est le produit tensoriel de ces deux espaces :

$$\mathcal{E}_H = \mathcal{E}_{\text{externe}} \otimes \mathcal{E}_{\text{spin}} \quad . \quad (12.11)$$

Tout élément $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_H$ s'écrit :

$$|\psi\rangle = |\psi_+\rangle \otimes |+\rangle + |\psi_-\rangle \otimes |-\rangle \quad , \quad (12.12)$$

où $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$ sont des éléments de $\mathcal{E}_{\text{externe}}$.

On note que les observables d'espace \hat{A}_{ext} (\hat{x}, \hat{p} , etc) et les observables de spin \hat{B}_{sp} (ex : \hat{S}_x, \hat{S}_y , etc.) agissent dans des espaces différents et commutent. Le produit (tensoriel) de deux telles observables est défini par :

$$\left(\hat{A}_{\text{ext}} \otimes \hat{B}_{\text{sp}} \right) (|\psi_\sigma\rangle \otimes |\sigma\rangle) = \left(\hat{A}_{\text{ext}} |\psi_\sigma\rangle \right) \otimes \left(\hat{B}_{\text{sp}} |\sigma\rangle \right) \quad \sigma = \pm \quad . \quad (12.13)$$

2.2 Représentation des états et observables

Il y a plusieurs représentations possibles des états, accompagnées de représentations correspondantes des observables, dont l'utilisation peut être plus ou moins commode suivant le problème considéré.

Représentation « hybride ». L'état est représenté par un vecteur de $\mathcal{E}_{\text{spin}}$ dont les composantes sont des fonctions de carré sommable :

$$\psi_+(\mathbf{r}, t)|+\rangle + \psi_-(\mathbf{r}, t)|-\rangle \quad . \quad (12.14)$$

Rappelons la signification physique de cette représentation : $|\psi_+(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ (resp. $|\psi_-(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$) est la probabilité de trouver la particule dans un voisinage d^3r du point \mathbf{r} avec $+\hbar/2$ (resp. $-\hbar/2$) comme projection de son spin suivant z .

Un opérateur dans $\mathcal{E}_{\text{externe}}$ agit sur les fonctions $\psi_{\pm}(\mathbf{r}, t)$, un opérateur de spin agit sur les vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$ suivant (12.2), (12.3) et (12.4), et les produits d'opérateurs $\hat{A}_{\text{ext}} \otimes \hat{B}_{\text{sp}}$ se déduisent de (12.13).

Fonction d'onde « à deux composantes ». Le vecteur d'état est alors représenté sous la forme :

$$\begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}, t) \\ \psi_-(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} . \quad (12.15)$$

L'interprétation physique de ψ_+ et ψ_- comme amplitudes de probabilité du couple de variables aléatoires (\mathbf{r}, S_z) est la même que ci-dessus.

États atomiques. Dans bon nombre de problèmes de physique atomique, il est commode d'utiliser les nombres quantiques usuels n, ℓ, m pour la classification des états $|n, \ell, m\rangle$ qui forment une base de $\mathcal{E}_{\text{externe}}$. L'introduction du spin se fait dans l'espace engendré par la famille $\{|n, \ell, m\rangle \otimes |\sigma\rangle\}$, où le nombre quantique de spin prend les deux valeurs ± 1 . Il est commode d'utiliser la notation compacte :

$$|n, \ell, m, \sigma\rangle \equiv |n, \ell, m\rangle \otimes |\sigma\rangle , \quad (12.16)$$

où les états d'un électron sont décrits par *quatre* nombres quantiques. L'action des opérateurs d'espace sur les états $|n, \ell, m\rangle$ étant connue (chapitre 11), l'action des opérateurs généraux sur les états $|n, \ell, m, \sigma\rangle$ se déduit immédiatement des considérations développées plus haut.

3 Moment magnétique de spin

Nous avons déjà indiqué au chapitre 10 comment la relation entre moment cinétique et moment magnétique d'un système donné permet un test quantitatif de la théorie du moment cinétique. Cette relation reste valable pour le degré de liberté de spin et elle conduit à une preuve directe de l'existence de moments cinétiques demi-entiers.

3.1 Expérience de Stern et Gerlach

Au moment cinétique de spin d'une particule correspond un moment magnétique qui lui est proportionnel :

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma \hat{\mathbf{S}} = \mu_0 \hat{\boldsymbol{\sigma}} , \quad (12.17)$$

avec $\mu_0 = \gamma\hbar/2$. Cette proportionnalité est fondamentale. Elle implique les relations de commutation entre les composantes du moment magnétique que nous avons établies phénoménologiquement dans l'étude de l'expérience de Stern et Gerlach au chapitre 8. Rappelons que cette expérience donne directement accès à la nature du moment cinétique de l'atome considéré. En effet la déviation des faisceaux est proportionnelle à μ_z , donc à J_z . Si le moment magnétique de l'atome est dû à un moment cinétique orbital, on doit observer un nombre impair de taches. L'observation d'un clivage en un nombre pair de taches, deux pour les atomes monovalents comme l'argent, est une preuve de l'existence de moments cinétiques demi-entiers.

3.2 Effet Zeeman anormal

Plongeons un atome, préparé dans un niveau d'énergie E et de moment cinétique j , dans un champ magnétique \mathbf{B} parallèle à l'axe z . L'énergie potentielle magnétique s'écrit :

$$\hat{W} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} \quad . \quad (12.18)$$

Le niveau correspondant est clivé en $2j + 1$ niveaux d'énergies respectives :

$$E - \gamma\hbar B_0 m \quad , \quad m = -j, \dots, j$$

Il se produit alors une démultiplication correspondante pour chaque raie observée dans le spectre. On sait que j doit être entier si tous les moments cinétiques sont des moments cinétiques orbitaux (c'est-à-dire interprétables de façon classique). Or, si j est entier, $2j + 1$ est impair et l'on s'attend à un clivage de chaque niveau en un nombre impair de sous-niveaux. L'étude du clivage des raies atomiques sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, observé pour la première fois par Zeeman dans la période 1896–1903, montre que dans de très nombreux cas, et en particulier pour les atomes alcalins, ce n'est pas le cas : il y a clivage des niveaux en un nombre pair de sous-niveaux !

Convaincu dès 1845 qu'il y avait une relation étroite entre les phénomènes optiques et magnétiques, Faraday, dans une des dernières expériences de sa vie, en 1862, avait tenté de mettre en évidence l'influence de champs magnétiques sur le rayonnement. Plusieurs problèmes techniques l'empêchèrent d'obtenir un résultat positif. Ce n'est qu'en 1896 que ces expériences furent reprises avec succès par Zeeman. Déjà, à partir de considérations classiques, les théoriciens de l'époque, en particulier H.A. Lorentz, prévoyaient un clivage en un nombre impair de raies (1 – pas de clivage – ou 3). C'est ce qu'observa d'abord Zeeman sur les spectres du cadmium et du zinc. La découverte, sur le sodium en particulier, de ce qu'on appela alors l'« effet Zeeman anormal », c'est-à-dire un nombre pair de raies, demeura pendant plus de 25 ans un véritable défi à la communauté scientifique, totalement perplexe devant le phénomène. Il fallut attendre, après des à-coups innombrables, les années 1925–1926, avec les idées de Pauli, d'Uhlenbeck et de Goudsmit, pour que l'introduction de la théorie du spin de l'électron clarifie complètement

ce problème, et que l'effet Zeeman dit « anormal » apparaisse au contraire comme découlant de la nature des choses.

3.3 Moment magnétique d'une particule élémentaire

L'électron, le proton et le neutron ont un spin 1/2. Le moment magnétique de spin correspondant est relié au spin \mathbf{s} par la relation $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma \hat{\mathbf{s}}$. L'expérience donne les valeurs suivantes des rapports gyromagnétiques :

$$\begin{array}{ll} \text{électron} & \gamma \simeq 2\gamma_0 = -q/m_e , \\ \text{proton} & \gamma \simeq +2,79 \, q/m_p , \\ \text{neutron} & \gamma \simeq -1,91 \, q/m_p . \end{array}$$

Les valeurs possibles des résultats de mesure d'une composante de ces moments magnétiques sont alors :

$$\begin{array}{ll} \text{électron} & \mu_z = \pm\mu_B = \mp q\hbar/2m_e , \\ \text{proton} & \mu_z = \pm 2,79 \, q\hbar/2m_p , \\ \text{neutron} & \mu_z = \pm 1,91 \, q\hbar/2m_p . \end{array}$$

La quantité $\mu_B = -9,274 \, 10^{-24} \, \text{J T}^{-1}$ est appelée magnéton de Bohr. La quantité $\mu_N = q\hbar/2m_p = 5,051 \, 10^{-27} \, \text{J T}^{-1}$ est appelée magnéton nucléaire.

La théorie relativiste de l'électron, due à Dirac, prédit pour la valeur du moment magnétique de l'électron :

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = g_e \left(\frac{q}{2m_e} \right) \hat{\mathbf{s}} \quad \text{avec} \quad g_e = 2 \quad .$$

La valeur trouvée expérimentalement pour le *facteur gyromagnétique* de l'électron coïncide presque avec cette prédiction. On peut rendre compte de la différence entre le résultat expérimental et la prédiction de l'équation de Dirac en prenant en compte le couplage entre l'électron et le champ électromagnétique quantifié (théorie de l'électrodynamique quantique). C'est là une des réussites les plus spectaculaires de la physique fondamentale, les valeurs expérimentale et théorique du facteur gyromagnétique étant en accord dans la limite des possibilités expérimentales (précision des mesures) et théoriques (capacité des ordinateurs). On a à l'heure actuelle pour l'électron, en posant $g_e = 2(1 + a)$:

$$a^{\text{theo.}} = 0,001 \, 159 \, 652 \, \underline{200} \, (40) \quad (12.19)$$

$$a^{\text{exp.}} = 0,001 \, 159 \, 652 \, \underline{193} \, (10) \quad (12.20)$$

les erreurs entre parenthèses portant sur les deux derniers chiffres. Les coefficients +2,79 et -1,91 du proton et du neutron sont dus à la structure interne de ces particules. Mesurés avec une grande précision par résonance magnétique : $\mu_p/\mu_N = 2,792 \, 847 \, \underline{386} \, (63)$ et $\mu_n/\mu_N = -1,913 \, 042 \, \underline{75} \, (45)$, ils sont calculés à 10 % près dans le modèle des quarks.

4 Variables d'espace et de spin non corrélées

Dans la plupart des situations physiques, l'expérience de Stern et Gerlach par exemple, il y a en principe *corrélation* des variables d'espace et de spin. Ainsi, en physique atomique, nous n'avons étudié au chapitre 11 qu'une première approximation de l'atome d'hydrogène où nous avons négligé l'influence du spin. Inclure la variable σ dans (12.16) entraîne dans cette approximation que les niveaux d'énergie des états $|n, \ell, m, +\rangle$ et $|n, \ell, m, -\rangle$ sont dégénérés. Dans la réalité, des corrections à cette approximation apparaissent, comme la *structure fine* de l'atome d'hydrogène, abordée au chapitre 13 et due à l'interaction entre le moment magnétique intrinsèque de l'électron et le champ électromagnétique créé par le proton. La dégénérescence en énergie est alors partiellement levée et les nouveaux états propres de l'hamiltonien sont des combinaisons linéaires des états de départ $|n, \ell, m, \sigma\rangle$. En d'autres termes, dans un niveau d'énergie fixée, la fonction d'onde spatiale de l'électron dépend de son état de spin et les deux variables aléatoires \mathbf{r} et S_z sont corrélées.

Toutefois, cette corrélation est souvent extrêmement faible. Dans ce cas, les deux variables aléatoires \mathbf{r} et S_z peuvent être considérées comme indépendantes et leur loi de probabilité est factorisée. Une telle situation physique sera représentée par un vecteur d'état factorisé :

$$\Phi(\mathbf{r}, t) \begin{pmatrix} \alpha_+(t) \\ \alpha_-(t) \end{pmatrix} \quad (12.21)$$

Si l'on fait dans ce cas des mesures de spin, les résultats seront indépendants de la position de la particule. Les seules observables qui interviennent sont des matrices hermitiennes 2×2 à coefficients numériques (dépendant éventuellement du temps).

De tels cas se produiront en pratique, en particulier dans les expériences de résonance magnétique nucléaire, et on emploiera le langage *état de spin du proton* et non *état du proton*, puisque la position du proton ne jouera aucun rôle dans l'expérience considérée.

5 La résonance magnétique

Nous avons indiqué dans le paragraphe qui précède la relation fondamentale entre moment cinétique et moment magnétique $\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{J}$. La détermination de la constante de proportionnalité γ est un enjeu pratique considérable. Pour des objets fondamentaux comme l'électron ou le proton, sa mesure précise constitue un test crucial des théories décrivant ces particules. Pour des noyaux plus complexes intervenant dans des molécules, la valeur de γ fournit des renseignements précieux sur l'environnement et les liaisons chimiques en jeu dans ces molécules.

Nous allons décrire ci-dessous comment effectuer une mesure précise de γ . Comme bien souvent en physique, il s'agit de tirer parti d'un phénomène de

résonance. Nous reviendrons ensuite plus longuement sur les applications de cette résonance magnétique, électronique ou nucléaire suivant les cas.

5.1 Précession de Larmor dans un champ magnétique fixe B_0

Choisissons l'axe z parallèle au champ \mathbf{B}_0 . Si l'on ne se préoccupe pas des variables spatiales (voir § 4), l'hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B}_0 = -\mu_0 B_0 \hat{\sigma}_z . \quad (12.22)$$

Posons :

$$-\mu_0 B_0 / \hbar = \omega_0 / 2 \quad , \quad \text{soit} \quad \omega_0 = -\gamma B_0 \quad . \quad (12.23)$$

Les états propres de \hat{H} sont les états propres $|+\rangle$ et $|-\rangle$ de $\hat{\sigma}_z$.

Considérons un état quelconque $|\psi(t)\rangle$ tel que $|\psi(0)\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$ avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Son évolution au cours du temps est :

$$|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-i\omega_0 t/2} |+\rangle + \beta e^{i\omega_0 t/2} |-\rangle . \quad (12.24)$$

La valeur moyenne $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle$ vaut :

$$\langle \mu_x \rangle = 2\mu_0 \operatorname{Re} (\alpha^* \beta e^{i\omega_0 t}) = C \cos(\omega_0 t + \varphi) \quad (12.25)$$

$$\langle \mu_y \rangle = 2\mu_0 \operatorname{Im} (\alpha^* \beta e^{i\omega_0 t}) = C \sin(\omega_0 t + \varphi) \quad (12.26)$$

$$\langle \mu_z \rangle = \mu_0 (|\alpha|^2 - |\beta|^2) \quad (12.27)$$

où C et φ sont respectivement le module et la phase du nombre complexe $\alpha^* \beta$. Nous retrouvons la précession de Larmor que nous avons présentée pour un moment cinétique quelconque au chapitre 10, § 4.2. La projection $\langle \mu_z \rangle$ du moment magnétique sur l'axe du champ est indépendant du temps et la composante de $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle$ perpendiculaire à \mathbf{B} tourne à vitesse angulaire ω_0 . Le fait que $\langle \mu_z \rangle$ soit une constante du mouvement est une conséquence de la relation de commutation $[\hat{H}, \hat{\mu}_z] = 0$ et du théorème d'Ehrenfest.

On en déduit une méthode simple pour mesurer la pulsation ω_0 . On place une bobine dans un plan parallèle à \mathbf{B}_0 et on prépare une assemblée macroscopique de spins, tous dans le même état $|\psi(0)\rangle$. La précession de $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle$ à la pulsation ω_0 provoque une variation périodique du flux magnétique dans la bobine, donc un courant induit mesurable de même pulsation. Cette méthode est toutefois moins précise que la technique de résonance magnétique que nous allons maintenant présenter.

5.2 Superposition d'un champ fixe et d'un champ tournant

Une technique, inventée par Rabi dans les années 1930, permet la mesure très précise de ω_0 grâce à un phénomène de résonance. Plaçons le moment magnétique dont on souhaite mesurer le rapport gyromagnétique γ dans un champ B_0 connu, et superposons un champ B_1 faible, tournant dans le plan xy à la vitesse angulaire ω ajustable. Un tel champ peut se construire au moyen

de deux bobines placées le long de x et y , alimentées en courant alternatif de pulsation ω et déphasées de $\pi/2$ (on travaille en l'occurrence à des fréquences hertziennes). Nous voulons montrer qu'à résonance, c'est-à-dire pour $\omega = \omega_0$, le spin bascule entre les deux états possibles $|\pm\rangle$. Notons que ce calcul, caractéristique d'un système à deux niveaux, est semblable à celui effectué pour traiter le maser à ammoniac au chapitre 6.

L'hamiltonien a maintenant la forme suivante :

$$\hat{H} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} = -\mu_0 B_0 \hat{\sigma}_z - \mu_0 B_1 \cos \omega t \hat{\sigma}_x - \mu_0 B_1 \sin \omega t \hat{\sigma}_y \quad . \quad (12.28)$$

Posons :

$$|\psi(t)\rangle = a_+(t)|+\rangle + a_-(t)|-\rangle \quad . \quad (12.29)$$

L'équation de Schrödinger mène, pour les coefficients $a_{\pm}(t)$, au système différentiel :

$$i\dot{a}_+ = \frac{\omega_0}{2} a_+ + \frac{\omega_1}{2} e^{-i\omega t} a_- \quad (12.30)$$

$$i\dot{a}_- = \frac{\omega_1}{2} e^{i\omega t} a_+ - \frac{\omega_0}{2} a_- \quad (12.31)$$

où nous avons posé $\mu_0 B_0/\hbar = -\omega_0/2$, $\mu_0 B_1/\hbar = -\omega_1/2$. Le changement de fonction $b_{\pm}(t) = \exp(\pm i\omega t/2) a_{\pm}(t)$ donne :

$$i\dot{b}_+ = -\frac{\omega - \omega_0}{2} b_+ + \frac{\omega_1}{2} b_- \quad (12.32)$$

$$i\dot{b}_- = \frac{\omega_1}{2} b_+ + \frac{\omega - \omega_0}{2} b_- \quad (12.33)$$

La transformation ci-dessus est la forme quantique d'un changement de référentiel qui fait passer du référentiel du laboratoire au référentiel tournant à la vitesse angulaire ω autour de l'axe z . Nous avons donc choisi une base de l'espace de Hilbert qui dépend du temps. Dans cette base, l'hamiltonien est indépendant du temps :

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega - \omega_0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}(\omega - \omega_0)\hat{\sigma}_z + \frac{\hbar}{2}\omega_1\hat{\sigma}_x \quad .$$

On vérifie que les équations (12.32,12.33) entraînent $\ddot{b}_{\pm} + (\Omega/2)^2 b_{\pm} = 0$ avec :

$$\Omega^2 = (\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2 \quad . \quad (12.34)$$

Supposons que le spin soit initialement dans l'état $|+\rangle$, soit $b_-(0) = 0$. On trouve alors :

$$b_-(t) = -\frac{i\omega_1}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \quad (12.35)$$

$$b_+(t) = \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + i\frac{\omega - \omega_0}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \quad . \quad (12.36)$$

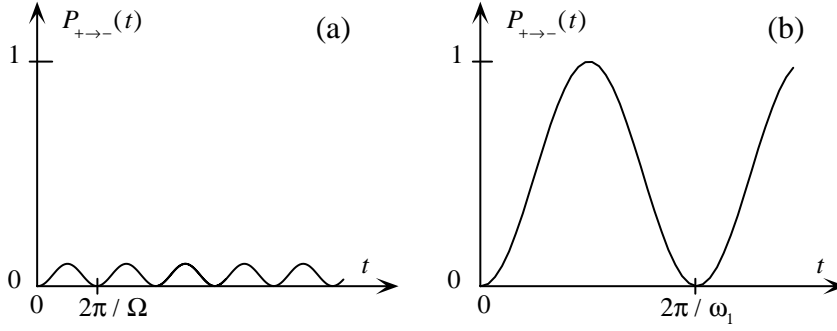


FIG. 12.2: Oscillation de Rabi (a) légèrement hors de la résonance $\omega - \omega_0 = 3\omega_1$; (b) à la résonance $\omega = \omega_1$.

La probabilité qu'une mesure de S_z au temps t donne le résultat $-\hbar/2$ est :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{+ \rightarrow -}(t) &= |\langle - | \psi(t) \rangle|^2 = |a_-(t)|^2 = |b_-(t)|^2 \\ &= \left(\frac{\omega_1}{\Omega} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{\Omega t}{2} \right) . \end{aligned} \quad (12.37)$$

Cette formule, que l'on doit à Rabi, met clairement en évidence le phénomène de résonance recherché :

- Si la fréquence ω du champ tournant est choisie notablement différente de la fréquence ω_0 que l'on souhaite mesurer (plus précisément si $|\omega - \omega_0| \gg \omega_1$), alors la probabilité que « le spin bascule », c'est-à-dire que l'on mesure $S_z = -\hbar/2$, est très faible pour tout t .
- Si l'on choisit $\omega = \omega_0$, alors $\Omega = \omega_1$ et la probabilité de basculement du spin est égale à 1 aux temps $t_n = (2n + 1)\pi/\omega_1$ (n entier), même si l'amplitude du champ tournant \mathbf{B}_1 est très faible.
- Pour $|\omega - \omega_0| \sim \omega_1$, l'amplitude de probabilité oscille avec une amplitude maximale appréciable, mais inférieure à 1.

Nous avons tracé sur la figure 12.2 l'oscillation temporelle de la probabilité $\mathcal{P}_{+ \rightarrow -}$ en dehors de résonance et à résonance. Pour un champ magnétique typique de 1 Tesla, la fréquence de résonance est $\omega_e/2\pi \sim 28$ GHz pour un électron, et $\omega_p/2\pi \sim 43$ MHz pour un proton. Ces fréquences correspondent à des ondes centimétriques dans le cas électronique et décimétriques dans le cas nucléaire.

5.3 Expérience de Rabi

L'effet de résonance décrit ci-dessus a été compris en 1939 par Rabi. Il fournit une méthode très précise de mesure d'un moment magnétique. L'appareil de Rabi est la combinaison de deux déflecteurs de Stern et Gerlach avec leur champ magnétique dans des directions opposées (figure 12.3). Entre les

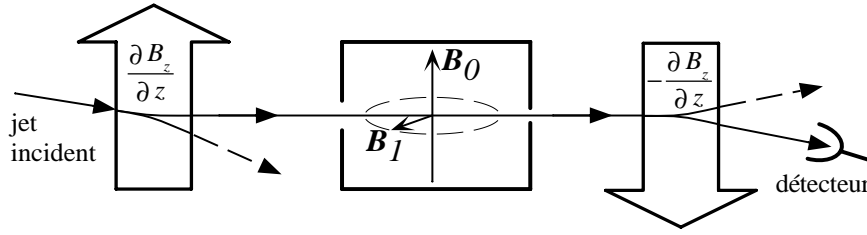


FIG. 12.3: Appareil développé par Rabi pour observer la résonance magnétique. En absence de résonance, toutes les particules émises dans l'état $|+\rangle$ atteignent le détecteur. Si la résonance se produit, les spins basculent entre les deux aimants et le signal décroît.

aimants de Stern et Gerlach, se trouve une zone où on superpose un champ uniforme \mathbf{B}_0 et un champ tournant \mathbf{B}_1 , comme décrit ci-dessus.

Considérons d'abord l'effet des deux aimants de Stern et Gerlach en absence des champs \mathbf{B}_0 et \mathbf{B}_1 . Une particule émise par la source dans l'état $|+\rangle$ est défléchie vers le haut, puis vers le bas, et atteint le détecteur. En présence des champs \mathbf{B}_0 et \mathbf{B}_1 , cela n'est plus vrai. Si la fréquence ω du champ tournant est proche de la fréquence de Larmor ω_0 , le phénomène de résonance change la composante μ_z de la particule. Quand le spin bascule entre les deux aimants de Stern et Gerlach, la particule est défléchie vers le haut par chaque aimant et n'est pas détectée. Le signal enregistré par le détecteur en fonction de la fréquence du champ tournant présente donc une baisse sensible quand $\omega = \omega_0$ (fig. 12.4). Cela conduit à une mesure du rapport :

$$\frac{|\mu|}{j} = \frac{\hbar\omega_0}{B_0},$$

pour une particule de moment cinétique j . Cette mesure est tellement précise que la détermination de B_0 est la source principale d'erreur. En pratique, comme on le voit sur la figure 12.4, la fréquence ω est maintenue fixe et on varie le champ \mathbf{B}_0 , ou, d'une manière équivalente, la pulsation ω_0 .

En 1933, Stern avait pu mesurer le moment magnétique du proton à 10 % près. Expérience difficile : les moments magnétiques nucléaires sont 1000 fois inférieurs aux moments magnétiques électroniques, il faut opérer sur des molécules H_2 ou HD , où les effets des électrons appariés s'annulent. Grâce à son dispositif de résonance, Rabi gagne, en 1939, un facteur 1000 en précision : la résonance est sélective en fréquence, la présence d'autres moments magnétiques n'est pas une gêne. Le résultat de Rabi frappe les esprits, il est accueilli comme un exploit. Stern fait remarquer qu'il atteint la limite théorique de précision, fixée par les relations d'incertitude. Hulthén, en annonçant l'attribution à Rabi du prix Nobel le 10 décembre 1944 à la radio de Stockholm, parle du « fantastique exploit d'avoir pu établir un contact radio avec les constituants ultimes de la matière, en découvrant leurs fréquences de

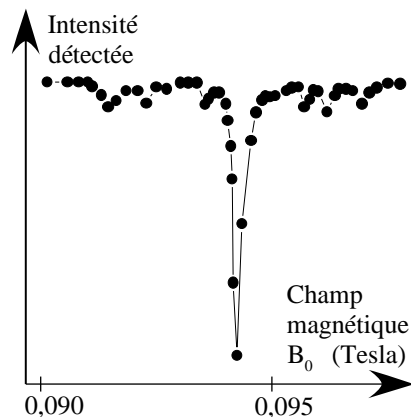


FIG. 12.4: Signal obtenu par Rabi avec un faisceau de molécules HD. On représente le signal enregistré sur le détecteur de la figure 12.3, en fonction du champ B_0 ($B_1 = 10^{-4}$ T, $\omega/2\pi = 4$ MHz).

réception ».

La grande percée des applications de la RMN vint avec les travaux de Felix Bloch à Stanford et de Edward Purcell au MIT en 1945. Grâce à la maîtrise des techniques de radiofréquences due au développement du radar pendant la deuxième guerre mondiale, Bloch et Purcell purent opérer non plus sur des faisceaux moléculaires mais directement sur de la matière condensée. On dispose alors d'un nombre macroscopique de spins, les signaux sont beaucoup plus intenses, les expériences beaucoup plus maniables. La résonance est observée en mesurant par exemple l'absorption de l'onde générant le champ tournant B_1 . La différence de population entre les deux états $|+\rangle$ et $|-\rangle$, nécessaire pour avoir un signal, résulte de l'équilibre thermodynamique. Dans un champ $B_0 = 1$ T, l'énergie magnétique d'un proton est $\mu_p B \sim 9 \cdot 10^{-8}$ eV et la différence de population entre les deux états de spin due au facteur de Boltzmann à température ambiante est $\pi_+ - \pi_- \sim 3 \cdot 10^{-6}$. Cette différence est petite, mais suffisante pour observer un signal raisonnable car on travaille avec des échantillons contenant un nombre macroscopique de spins (typiquement 10^{23}).

5.4 Applications de la résonance magnétique

Les applications de la résonance magnétique sont innombrables dans des domaines aussi variés que la physique de l'état solide et des basses températures, la chimie, la biologie ou la médecine. Par ses effets magnétiques, le spin joue le rôle de sonde locale au sein de la matière. La RMN a transformé l'analyse chimique et la détermination de la structure des molécules (voir par exemple la figure 12.5). Elle est devenue un outil de choix en biologie et a permis de faire des progrès considérables dans la connaissance des macromolécules, et, de façon générale, en biologie moléculaire. Depuis 1980, elle a également révolutionné le diagnostic médical et la physiologie. Elle permet de mesurer et de visualiser en trois dimensions et avec une précision spatiale inférieure

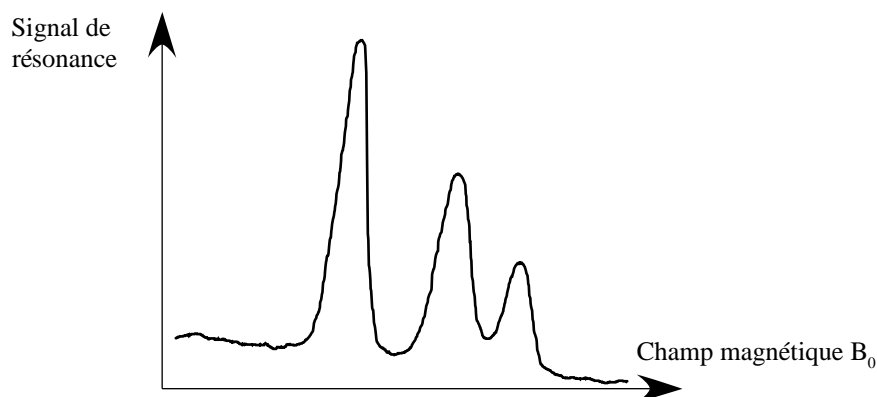


FIG. 12.5: Une des premières applications de la résonance magnétique nucléaire à la chimie : le signal de résonance obtenu avec les protons de la molécule d'éthanol $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ consiste en une structure à trois pics. Ces pics sont associés respectivement aux trois protons du groupe CH_3 , aux deux protons du groupe CH_2 , et à l'unique proton du groupement OH . Le champ magnétique B_0 vaut $\sim 0,8 \text{ T}$, et la courbe correspond à une variation totale de $7,5 \mu\text{T}$.

au millimètre la concentration en eau de la « matière molle » (muscles, cerveau,...) qui, au contraire des os, est difficile à observer aux rayons X. On étudie de cette manière le métabolisme des tissus vivants, on peut détecter des lésions internes, des tumeurs. Le spin nucléaire, objet de curiosité pour quelques physiciens illuminés des années 1940 et 1950, est devenu un des espoirs de la médecine d'aujourd'hui.

On peut désormais visualiser l'activité du cerveau vivant en temps réel. On parvient par exemple à localiser et à enregistrer la réponse du cortex cérébral visuel à une stimulation. Le pas suivant consiste, après avoir soumis un volontaire une séquence de stimulations, à demander au sujet de *penser au signal*. La réponse du cerveau, enregistrée par RMN, est *la même* que celle obtenue par stimulation ! Cela constitue une des premières preuves directes que nous pensons (ce qui est rassurant pour l'esprit...).

5.5 Rotation de 2π d'un spin $1/2$

Il semble évident, et découlant du sens commun géométrique, qu'une rotation de 2π d'un système autour d'un axe fixe est équivalente à l'identité. Cependant cela n'est pas vrai *stricto sensu* pour un spin $1/2$.

Reprenons le calcul du paragraphe § 5.1 et supposons qu'à $t = 0$ l'état du spin est $|+x\rangle$:

$$|\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) \quad .$$

Le moment magnétique moyen, donné par (12.25), (12.26) et (12.27) est $\langle \mu \rangle = \mu_0 \mathbf{u}_x$. L'équation (12.24) donne l'évolution de cet état. Au bout du

temps $t = 2\pi/\omega_0$, classiquement, le système a précessé de 2π autour de \mathbf{B} . Quantiquement, on vérifie également que le moment magnétique est revenu à sa valeur initiale $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = \mu_0 \mathbf{u}_x$. Qu'en est-il du vecteur d'état du spin ? On vérifie bien que $|\psi(t)\rangle$ est à nouveau état propre de \hat{S}_x (ou de $\hat{\mu}_x$) avec valeur propre $+\hbar/2$, mais, surprise, ce vecteur d'état a *changé de signe* :

$$|\psi(t = 2\pi/\omega_0)\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) = -|\psi(0)\rangle \quad .$$

Une rotation de 2π n'est donc pas équivalente à l'identité pour un spin 1/2. Seules les rotations de $4n\pi$ redonnent identiquement le vecteur d'état initial. Cette propriété s'entrevoit d'ailleurs sur la dépendance $e^{im\varphi}$ dans le cas des moments cinétiques orbitaux : l'application de $e^{im\varphi}$ pour $m = 1/2$ et $\varphi = 2\pi$ donnerait $e^{i\pi} = -1$.

Découverte dès l'introduction du spin 1/2 en 1926, cette particularité a constitué pendant plus de 50 ans un sujet de controverse ; cette phase du vecteur d'état acquise dans une rotation de 2π a-t-elle un sens physique, est-elle mesurable ? La réponse expérimentale, positive, n'a été donnée que dans les années 80 dans une série d'expériences remarquables¹. On fait passer les spins 1/2 dans un interféromètre à deux voies. Dans l'une des voies, on dispose un champ magnétique effectuant cette rotation de 2π . Le changement de signe de la fonction d'onde pour la voie ainsi modifiée se traduit par un décalage des franges d'interférences. Le fait qu'une rotation de 2π d'un spin 1/2 ne soit pas équivalente à l'identité, contrairement au sens commun, manifeste une fois encore que cette grandeur est proprement quantique.

Cette propriété du spin reflète une structure mathématique importante reliant les deux groupes SO (3) et SU (2). Voyons d'abord comment ces groupes apparaissent dans ce contexte. Les rotations dans l'espace R^3 forment le groupe bien connu SO (3). Chaque rotation \mathcal{R} de R^3 peut se paramétrer par un vecteur unitaire \mathbf{u} (l'axe orienté de la rotation) et un angle de rotation φ ($0 \leq \varphi \leq \pi$) autour de cet axe ; à chaque rotation $\mathcal{R} \equiv (\mathbf{u}, \varphi)$, on peut associer un *opérateur rotation* $\hat{M}(\mathcal{R})$ de $\mathcal{E}_{\text{spin}}$:

$$\hat{M}(\mathcal{R}) = \cos(\varphi/2)\hat{I} - i\sin(\varphi/2)\mathbf{u} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$$

Cet opérateur rotation est unitaire ($\hat{M}\hat{M}^\dagger = \hat{M}^\dagger\hat{M} = \hat{I}$), de déterminant 1, et il donne le transformé $|\psi'\rangle$ d'un vecteur d'état $|\psi\rangle$ dans une rotation \mathcal{R} : $|\psi'\rangle = \hat{M}(\mathcal{R})|\psi\rangle$. On peut vérifier immédiatement cette propriété grâce au résultat (12.24) (cas particulier $\mathbf{u} = \mathbf{u}_z$, $\varphi = \omega_0 t$). On dit que le groupe formé par les matrices $\hat{M}(\mathcal{R})$ constitue une *représentation* du groupe des rotations. Le signe $-$ trouvé précédemment est la conséquence d'une propriété générale de cette représentation : il s'agit d'une représentation *projective*, c'est-à-dire que, pour deux rotations quelconques \mathcal{R} et \mathcal{R}' , $\hat{M}(\mathcal{R}\mathcal{R}')$ n'est pas égale *stricto sensu* à $\hat{M}(\mathcal{R})\hat{M}(\mathcal{R}')$, mais peut en différer par un facteur de phase. En

¹A.W. Overhauser, A.R. Colla and S.A. Werner, Phys. Rev. Lett. **33**, 1237 (1974) ; **34**, 1472 (1975) ; **35**, 1053 (1975).

particulier, si on choisit $\mathcal{R} = \mathcal{R}' \equiv (\mathbf{u}_z, \pi)$, on trouve :

$$\mathcal{R} \mathcal{R}' = I_{R^3} \quad \text{mais} \quad \hat{M}(\mathcal{R}) \hat{M}(\mathcal{R}') = (-i\hat{\sigma}_z)(-i\hat{\sigma}_z) = -\hat{I}$$

Mathématiquement, on dit qu'il y a isomorphisme local entre des algèbres de des groupes $SO(3)$ et $SU(2)$, mais que par contre ces deux groupes ne sont pas globalement isomorphes (voir le cours de l'X d'A. Guichardet, *Groupes de Lie, représentations*, qui permet d'approfondir la compréhension de la nature mathématique des opérateurs et états propres du moment cinétique). Ce formalisme, qu'on appela plus tard *théorie des spineurs*, a été développé au début du siècle par le mathématicien Elie Cartan.

Pour en savoir plus

- En ce qui concerne le développement des idées ayant conduit au concept du spin, voir par exemple M. Jammer, *The conceptual development of Quantum Mechanics*, chapitre 3 (Mc Graw-Hill, New-York, 1956) ; G. Uhlenbeck, *Fifty years of spin*, Physics Today, juin 1976, p. 43.
- Quelques références concernant l'utilisation de la résonance magnétique nucléaire en chimie ou en biologie : M. Ptak, *Les prix Nobel 1991 : la consécration de la RMN*, La Recherche, décembre 1991 ; J.-M. Lhoste, *La structure des protéines « vue » par résonance magnétique nucléaire*, La Recherche, décembre 1991 ; I.L. Pykett, *Les applications médicales de la RMN*, Pour La Science, juillet 1982 ; B. Mazoyer, *Les nouveaux progrès de l'imagerie*, La Recherche, juillet-août 1996 ; Numéro spécial de Pour la Science, novembre 1992 : *Le cerveau et la pensée*.
- Pour la relation entre spin et théorie des groupes, voir par exemple E. Cartan, *Leçons sur la théorie des spineurs*, Paris (1937) ; repris en anglais : *The Theory of Spinors* (Hermann, Paris, 1966).

Exercices

1. Produit de matrices de Pauli. Montrer que :

$$\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k = \delta_{j,k} + i\varepsilon_{j,k,\ell} \hat{\sigma}_\ell \quad (12.38)$$

où $\varepsilon_{j,k,\ell} = 1$ (resp. -1) si (j, k, ℓ) est une permutation paire (resp. impaire) de (x, y, z) , et $\varepsilon_{j,k,\ell} = 0$ autrement.

2. Algèbre des matrices de Pauli. Considérons les matrices de Pauli $\hat{\sigma}$, et deux vecteurs \mathbf{A} et \mathbf{B} . Montrer que :

$$(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\hat{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) .$$

3. Moment cinétique de spin et moment cinétique orbital. Considérons une particule de spin $1/2$ dont l'état est $|\psi\rangle = \psi_+(\mathbf{r})|+\rangle + \psi_-(\mathbf{r})|-\rangle$. Soit $\hat{\mathbf{S}}$ l'observable de spin et $\hat{\mathbf{L}}$ l'observable de moment cinétique orbital. On

suppose que :

$$\begin{aligned}\psi_+(\mathbf{r}) &= R(r) \left(Y_{0,0}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{1,0}(\theta, \varphi) \right) , \\ \psi_-(\mathbf{r}) &= \frac{R(r)}{\sqrt{3}} (Y_{1,1}(\theta, \varphi) - Y_{1,0}(\theta, \varphi)) .\end{aligned}$$

- Quelle est la condition de normalisation sur $R(r)$?
- Quelles sont les probabilités de trouver $\pm \hbar/2$ dans une mesure de S_z ou de S_x ?
- Quels sont les résultats possibles d'une mesure de L_z ? Indiquer les probabilités correspondantes.

4. Origine géométrique des relations de commutation de $\hat{\mathbf{J}}$. La définition générale du moment cinétique $\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ d'un système quantique est fondée sur la transformation de l'état de ce système lors d'une rotation. Plus précisément, on pose que dans une rotation d'axe \mathbf{u} et d'angle infinitésimal $d\varphi$, le vecteur d'état $|\psi\rangle$ du système est changé en :

$$|\psi\rangle \longrightarrow \left(1 - i d\varphi \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{J}} + \dots \right) |\psi\rangle , \quad (12.39)$$

où les termes négligés sont au moins d'ordre $d\varphi^2$ (cf. exercice 1 du chapitre 5). Par ailleurs, une rotation géométrique d'axe \mathbf{u} et d'angle $d\varphi$ dans l'espace euclidien à trois dimensions transforme un vecteur quelconque \mathbf{V} en :

$$\mathbf{V} \longrightarrow \mathbf{V} + d\varphi \mathbf{u} \times \mathbf{V} + \dots$$

- On considère la succession des quatre rotations suivantes :
 - rotation autour de l'axe x d'angle $d\alpha$,
 - rotation autour de l'axe y d'angle $d\beta$,
 - rotation autour de l'axe x d'angle $-d\alpha$,
 - rotation autour de l'axe y d'angle $-d\beta$,
 On s'intéresse à la transformation géométrique qui en résulte, à l'ordre 2 inclus en $d\alpha$ et $d\beta$.
 - Justifier pourquoi les termes en $d\alpha^2$ et $d\beta^2$ ne contribuent pas.
 - Calculer le terme en $d\alpha d\beta$.
 - Montrer que la transformation résultant de la composition de ces quatre rotations infinitésimales est une rotation d'axe z et d'angle $-d\alpha d\beta$.
- On fait subir à un système quantique quelconque la succession de rotations décrite ci-dessus.
 - Ecrire l'état final du système en fonction de l'état initial $|\psi\rangle$, de $\hat{\mathbf{J}}$ et des angles $d\alpha$ et $d\beta$ (on se limitera à l'ordre deux en ces angles).

- (ii) En déduire qu'on est amené à poser $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z$ pour assurer la cohérence de la définition (12.39).
- c. On considère un spin 1/2, que l'on fait tourner autour de l'axe z .
 - (i) Comment se transforme le vecteur d'état $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$ dans une rotation d'angle infinitésimal $d\varphi$?
 - (ii) Généraliser le résultat au cas d'un angle φ quelconque.
 - (iii) Relier ce résultat au phénomène de précession de Larmor discuté au paragraphe 5.1 de ce chapitre.

