Mécanique Quantique I

Séance 10

Rappels

- Soit J, un opérateur moment cinétique quelconque

$$J_z|j,m_j\rangle = \hbar m_j |j,m_j\rangle$$
$$J^2|j,m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j,m_j\rangle$$
$$-j \leq m_j \leq j$$

- On peut définir

$$J_+ = J_x + iJ_y$$
$$J_- = J_x - iJ_y$$

où $\quad J_\pm |j,m_j\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)}\,|j,m_j \pm 1\rangle$

Alors $\quad J_x = \dfrac{J_+ + J_-}{2} \quad$ et $\quad J_y = \dfrac{J_+ - J_-}{2i}$

$$\bar{J} = \bar{J}_1 + \bar{J}_2 \quad , |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad , j_1 + j_2 + j \in \mathbb{N}$$
$$|j - j_2| \leq j_1 \leq j + j_2$$
$$|j - j_1| \leq j_2 \leq j + j_1$$

- $J = J_1 + J_2$ et les nombres quantiques associés J, M, j_1, m_1, j_2, m_2
Les vecteurs propres normés de l'ECOC $\{J_1^2, J_{1z}, J_2^2, J_{2z}\}$
donnés par $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ et
les vecteurs propres normés de l'ECOC : $\{J_1^2, J_2^2, J^2, J_z\}$
donnés par $|j_1 j_2 J M\rangle$
sont liés par les coefficients de Clebsch-Gordan

$$|j_1 j_2 J M\rangle = \sum_{m_1, m_2} \underbrace{(j_1 j_2 m_1 m_2 | J M)}_{\substack{\equiv \\ \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 J M\rangle}} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$$

$$\sum_{JM} (j_1 j_2 m_1 m_2 | JM)(j_1 j_2 m_1' m_2' | JM) = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}$$

- Le coefficient 3jm :

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1-j_2-m_3} (2j_3+1)^{-1/2} (j_1 j_2 m_1 m_2 | j_3 - m_3)$$

Les propriétés de symmetrie

i) $\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$

ii) $\begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$

iii) $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$

$\Rightarrow \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0$ si $j_1+j_2+j = 2n+1$, $n \in \mathbb{N}$

Exercice 1

a) i. $J = 1 \oplus 1 \Rightarrow 0 \leq J \leq 2 \Rightarrow J \in \{0, 1, 2\}$

ii. $J = \frac{3}{2} \oplus 5 \Rightarrow \frac{7}{2} \leq J \leq \frac{13}{2} \Rightarrow J \in \{\frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}, \frac{13}{2}\}$

iii. $J = \frac{3}{2} \oplus \frac{5}{2} \Rightarrow 1 \leq J \leq 4 \Rightarrow J \in \{1, 2, 3, 4\}$

iv. $J = 0 \oplus 4 \Rightarrow 4 \leq J \leq 4 \Rightarrow J = 4$

v. $J = \frac{5}{2} \oplus \frac{5}{2} \Rightarrow 0 \leq J \leq 5 \Rightarrow J \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$

on utilise $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$

b) i. $(3, 5, 1) \longrightarrow j_1 + j_2 + j = 9 \in \mathbb{N}$

$\left.\begin{matrix} j_1 = 3 \\ j_2 = 5 \end{matrix}\right\} \Rightarrow 2 \leq j \leq 8$, mais $j = 1$ donc X

ii. $(0, 4, 4) \rightarrow 0 + 4 + 4 = 8 \in \mathbb{N}$

$4 \leq j \leq 4$, $j = 4$ donc V

iii. $(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}) \rightarrow \frac{3}{2} + \frac{3}{2} + \frac{3}{2} = \frac{9}{2} \notin \mathbb{N}$ donc X

$0 \leq j \leq 3$, $j = \frac{3}{2}$

iv. $(\frac{5}{2}, 2, \frac{1}{2}) \rightarrow \frac{5}{2} + 2 + \frac{1}{2} = 5 \in \mathbb{N}$

$\frac{1}{2} \leq j \leq \frac{9}{2}$, $j = \frac{1}{2}$ donc V

v. $(3, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}) \rightarrow 3 + \frac{3}{2} + \frac{1}{2} = 5 \in \mathbb{N}$

$\frac{3}{2} \leq j \leq \frac{9}{2}$, $j = \frac{1}{2}$, donc X

c) i. $\frac{7}{2} \oplus \frac{3}{2} = J$

$j = \frac{7}{2} + \frac{3}{2} \Rightarrow 2 \leq j \leq 5 \Rightarrow j \in \{2, 3, 4, 5\}$

ii. $J \oplus 3 = 2$

$j = 3 \oplus 2 \Rightarrow 1 \leq j \leq 5 \Rightarrow j \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$

iii. $\frac{7}{2} \oplus J = 1$

$j = \frac{7}{2} \oplus 1 \Rightarrow \frac{5}{2} \leq j \leq \frac{9}{2} \Rightarrow j \in \{\frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}\}$

iv. $J \oplus 0 = \frac{5}{2}$

$j = 0 \oplus \frac{5}{2} \Rightarrow \frac{5}{2} \leq j \leq \frac{5}{2} \Rightarrow j = \frac{5}{2}$

v. $6 \oplus J = 0$

$j = 6 \oplus 0 \Rightarrow 6 \leq j \leq 6 \Rightarrow j = 6$

Exercice 2

$J = L + S \quad , \; |l\, m_l\rangle \otimes |s\, m_s\rangle \equiv |l\, m_l\, m_s\rangle \quad , \; s = 1/2$

$L_z |l m_l\rangle = \hbar m_l |l m_l\rangle \qquad\qquad S_z |s m_s\rangle = \hbar m_s |s m_s\rangle$

$L^2 |l m_l\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l m_l\rangle \qquad\qquad S^2 |s m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s m_s\rangle$

$\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad = \frac{3}{4}\hbar^2 |s m_s\rangle$

On continue avec $\hbar = 1$.

$L_+ = L_x + i L_y \quad , \quad L_- = L_x - i L_y$

$S_+ = S_x + i S_y \quad , \quad S_- = S_x - i S_y$

$L_\pm |l m_l\rangle = a_{l\pm} |l\, m_l \pm 1\rangle \quad , \; a_{l\pm} \equiv \sqrt{l(l+1) - m_l(m_l \pm 1)}$

$S_\pm |s m_s\rangle = a_{s\pm} |s\, m_s \pm 1\rangle \quad , \; a_{s\pm} \equiv \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)}$

$s = \frac{1}{2} \Rightarrow m_s = \pm\frac{1}{2} \Rightarrow a_{s\pm} = 1$

a) $J^2 = (L+S)^2 = L^2 + S^2 + L\cdot S + S\cdot L$

$\qquad = L^2 + S^2 + 2(L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z)$

$\qquad (L, S$ commutent$)$

Aussi : $J^2 = L^2 + S^2 + 2\left(\frac{L_+ + L_-}{2}\;\frac{S_+ + S_-}{2} + \frac{L_+ - L_-}{2i} + \frac{S_+ - S_-}{2i} + L_z S_z\right)$

Pour trouver la représentation de J^2 dans la base des états $|l m_l\rangle \otimes |s m_s\rangle$, il faut calculer les éléments de cet opérateur dans cette base :

$$\langle l m_l s m_s | J^2 | l m_l' s m_s' \rangle = \langle l m_l s m_s | L^2 + S^2 + 2L_zS_z + L_+S_- + L_-S_+ | l m_l' s m_s' \rangle$$

$$= \langle l m_l s m_s | L^2 + S^2 + 2L_zS_z | l m_l' s m_s' \rangle \rightarrow I_1$$

$$+ \langle l m_l s m_s | L_+ S_- | l m_l' s m_s' \rangle \rightarrow I_2$$

$$+ \langle l m_l s m_s | L_- S_+ | l m_l' s m_s' \rangle \rightarrow I_3$$

$$I_1 = \left(l(l+1) + \frac{3}{4} + 2 m_l' m_s'\right) \langle l m_l s m_s | l m_l' s m_s' \rangle$$

$$I_1 = \left(l(l+1) + \frac{3}{2} + 2 m_l m_s\right) \delta_{m_l m_l'} \delta_{m_s m_s'}$$

$$I_2 = a_{l+}' \langle l, m_l, s, m_s | l, m_l'+1, s, m_s'-1 \rangle \quad \begin{cases} m_s' = \frac{1}{2}, & m_s'-1 = -\frac{1}{2} \quad \checkmark \\ m_s = -\frac{1}{2}, & m_s'-1 = -\frac{3}{2} \quad \times \end{cases}$$

$$= a_{l+}' \delta_{m_l, m_l'+1} \cdot \delta_{m_s, m_s'-1}$$

$$I_3 = a_{l-}' \delta_{m_l, m_l'-1} \delta_{m_s, m_s'+1}$$

$$, m_s' = -\frac{1}{2} \quad , m_s'+1 = \frac{1}{2}$$

$$m_s' = \frac{1}{2} \quad , m_s'+1 = \frac{3}{2} \quad \times$$

Finalement :

$$\langle l m_l s m_s | J^2 | l m_l' s m_s' \rangle = \left(l(l+1) + \frac{3}{4} + 2 m_l m_s\right) \delta_{m_l m_l'} \delta_{m_s m_s'}$$

$$+ a_{l+}' \delta_{m_l, m_l'+1} \cdot \delta_{m_s, -\frac{1}{2}}$$

$$+ a_{l-}' \delta_{m_l, m_l'-1} \cdot \delta_{m_s, 1/2}$$

On représenter ces éléments de matrice sous la forme d'une matrice carré de dimensions $2(2l+1)$. (c'est la plus simple convention)

$$m_s = \pm\frac{1}{2} \quad , \quad -l \leq m_l \leq l$$

Donc

$$\begin{array}{c|cccccccc} & -l, -\frac{1}{2} & -l, +\frac{1}{2} & -l+1, -\frac{1}{2} & -l+1, -\frac{1}{2} & \cdots & l, -\frac{1}{2} & l, +\frac{1}{2} \\ \hline -l', -\frac{1}{2} & & & & & & & \\ -l', +\frac{1}{2} & & & & & & & \\ -l'+1, -\frac{1}{2} & & & & & & & \\ -l'+1, +\frac{1}{2} & & & & & & & \\ \vdots & & & & & & & \\ l', -\frac{1}{2} & & & & & & & \\ l', +\frac{1}{2} & & & & & & & \end{array}$$

On a défini donc la matrice à ce façon que les lignes représentent les nombres m_l', m_s' et les colonnes les nombres m_l, m_s. Pour chaque valeur de m_l (ou m_l') on a deux colonnes (ou deux lignes) correspondant aux deux valeurs $-\frac{1}{2}$ et $\frac{1}{2}$ de m_s (ou m_s').

On cherche les éléments non nuls

- Quand $m_l = m_l'$ et $m_s = m_s'$ (les termes diagonals)

$$\langle l\, m_l\, s\, m_s | J^2 | l\, m_l'\, s\, m_s' \rangle = l(l+1) + \frac{3}{4} + 2 m_l m_s$$

- Quand $m_l = m_l' + 1$ et $m_s = -\frac{1}{2}$ (les termes "up-diagonal" ou $m_s = -\frac{1}{2}$)

$$\langle l\, m_l\, s\, m_s | J^2 | l\, m_l'\, s\, m_s' \rangle = \alpha'_{l+} = \sqrt{l(l+1) - m_l'(m_l+1)}$$

- Quand $m_l = m_l' - 1$ et $m_s = +\frac{1}{2}$ (les termes "down-diagonal" ou $m_s = +\frac{1}{2}$)

$$\langle l\, m_l\, s\, m_s | J^2 | l\, m_l'\, s\, m_s' \rangle = \alpha'_{l-} = \sqrt{l(l+1) - m_l'(m_l - 1)}$$

On voit donc que les éléments non nuls sont ceux qui vérifient

$$m_l + m_s = m_l' + m_s'$$

La matrice devient

$$\begin{pmatrix} \times & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \times & \times & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \times & \times & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \times & \times & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \times & \times & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \times \end{pmatrix}$$

$\times$: éléments non nuls

A part pour les valeurs extrêmes, chaque valeur de $m_s' + m_l'$ (resp. de $m_l + m_s$) correspond à deux lignes (resp. deux colonnes). Donc chaque "bloc" avec des éléments non nuls est de taille 2×2, car il existe seulement 4 possibilités pour obtenir $m_l + m_s = m_l' + m_s'$.

1. $m_l = m_l'$, $m_s = m_s' = \frac{1}{2}$
2. $m_l = m_l'$, $m_s = m_s' = -\frac{1}{2}$
3. $m_l = m_l' + 1$, $m_s = m_s' - 1 = -\frac{1}{2}$
4. $m_l = m_l' - 1$, $m_s = m_s' + 1 = \frac{1}{2}$

Diagonaliser la matrice revient à diagonaliser chacun des blocs. On appelle T les matrices 2×2.

$$T = \begin{array}{c|cc} & m_l = m_l',\ m_s = \frac{1}{2} & m_l = m_l' + 1,\ m_s = -\frac{1}{2} \\ \hline m_l',\ m_s' = \frac{1}{2} & l(l+1) + \frac{3}{4} + 2m_l' \cdot \frac{1}{2} & \sqrt{l(l+1) - m_l'(m_l'+1)} \\ m_l'+1,\ m_s' = -\frac{1}{2} & \sqrt{l(l+1) - m_l(m_l-1)} & l(l+1) + \frac{3}{4} + 2m_l'\left(-\frac{1}{2}\right) \end{array}$$

Pour diagonaliser la matrice T, il suffit de trouver ses valeurs propres.

$$\det(T - \lambda I) = 0 \Rightarrow \ldots \Rightarrow \lambda^2 - \lambda\left(2l(l+1) + \frac{1}{2}\right) + (l(l+1))^2 - \frac{1}{2}l(l+1) - \frac{3}{16} = 0$$

$$\Delta = \left(2l(l+1) + \frac{1}{2}\right)^2 - 4\left[(l(l+1))^2 - \frac{1}{2}l(l+1) - \frac{3}{16}\right] = \ldots = (2l+1)^2$$

$$\lambda_\pm = \frac{2l(l+1) + \frac{1}{2} \pm (2l+1)}{2}$$

$$\rightarrow \lambda_+ = l^2 + 2l + \frac{3}{4} = \left(l + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{3}{2}\right)$$

$$\rightarrow \lambda_- = l^2 - \frac{1}{4} = \left(l + \frac{1}{2}\right)\left(l - \frac{1}{2}\right)$$

$$T = \begin{pmatrix} \left(l + \frac{1}{2}\right)\left(l - \frac{1}{2}\right) & 0 \\ 0 & \left(l + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{3}{2}\right) \end{pmatrix}$$

Calcul des vecteurs propres.
Les états propres de J^2 sont les états propres $|j_1 j_2 j m\rangle$ de d'ECOC $\{J_1^2, J_2^2, J^2, J_z\}$. Pour les déterminer, nous allons utiliser la formule (4) & definis dans le rappel

$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j m\rangle \, |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$$

liant ces états aux états $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ par l'intermédiaire des coef. de Clebsch-Gordon. Donc il suffit de déterminer ces coef.

- Pour les valeurs limites: $M = \pm(\ell + \frac{1}{2})$ $\quad (M = m_\ell + m_s)$
  - Si $M = -\ell - \frac{1}{2} \Rightarrow m_\ell = m_\ell' = -\ell \;, m_s = m_s' = -\frac{1}{2}$
  - Si $M = \ell + \frac{1}{2} \Rightarrow m_\ell = m_\ell' = \ell \;, \; m_s = m_s' = +\frac{1}{2}$

  $J = \ell + s \;, J = \ell + \frac{1}{2}$

  Alors $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = |\ell m_\ell s m_s\rangle = |\ell, \pm\ell\rangle \otimes |1/2, \pm\frac{1}{2}\rangle$

  $|j_1 j_2 j m\rangle = |\ell s j m\rangle = |\ell, \pm\ell\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$

- Pour les autres valeurs, il suffit de trouver les coef. de C-G (c'est la question b).

b) Pour les autres valeurs, on a des blocs 2×2, la matrice T.
On sait que les valeurs propres d'un opérateur J^2 sont du type $J(J+1)$.
$J = \ell \pm \frac{1}{2}$
Les vecteurs propres:
$|J M\rangle = a\,|\ell m_\ell\rangle \otimes |s m_s\rangle + b\,|\ell m_\ell'\rangle \otimes |s m_s'\rangle$
On a les valeurs propres $(\lambda_\pm)$ donc il faut déterminer les composantes a et b telles que

$$T\begin{pmatrix} a_\pm \\ b_\pm \end{pmatrix} = \lambda_\pm \begin{pmatrix} a_\pm \\ b_\pm \end{pmatrix}$$

$$T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}$$

On obtient les equations suivantes:

$$T_{11}\, a_\pm + T_{12}\, b_\pm = \lambda_\pm\, a_\pm$$

$$T_{21}\, a_\pm + T_{22}\, b_\pm = \lambda_\pm\, b_\pm$$

$$\Rightarrow \left(l(l+1) + \tfrac{1}{4} - M\right) a_\pm + \sqrt{l(l+1) + \tfrac{1}{4} - M^2}\, b_\pm = \lambda_\pm\, a_\pm$$

$$\sqrt{l(l+1) + \tfrac{1}{4} - M^2}\, a_\pm + \left(l(l+1) + \tfrac{1}{4} + M\right) b_\pm = \lambda_\pm\, b_\pm$$

On a la condition de normalisation, donc il suffit de trouver la solution d'une de deux équations.

- Pour λ_+, $J = l + \frac{1}{2}$

$$\left(l(l+1) + \tfrac{1}{4} - M - (l^2 + 2l + \tfrac{3}{4})\right) a_+ + \sqrt{l(l+1) + \tfrac{1}{4} - M^2}\, b_+ = 0$$

$$\Leftrightarrow \dots \Leftrightarrow \quad b_+ = a_+ \sqrt{\frac{l + 1/2 + M}{l + 1/2 - M}}$$

La condition de normalisation

$$a_+^2 + b_+^2 = 1 \Rightarrow \left(1 + \frac{l + 1/2 + M}{l + 1/2 - M}\right) a_+^2 = 1$$

$$\Rightarrow \begin{cases} a_+ = \pm \sqrt{\dfrac{l + 1/2 - M}{2l+1}} \\[2em] b_\pm = \pm \sqrt{\dfrac{l + 1/2 + M}{2l+1}} \end{cases}$$

on peut choisir le signe qu'on veut pour a_+. Le signe juste rajouter une phase globale, qui n'est pas mesurable.
Le choix du signe de a_+ fixe le signe de b_+, donc il faut avoir le même signe.

$$a_+ = \sqrt{\frac{l + 1/2 - M}{2l+1}}, \quad b_+ = \sqrt{\frac{l + 1/2 + M}{2l+1}}$$

- Pour λ_-, $J = l - \frac{1}{2}$

$$\left(l(l+1) + 1/4 - M - (l^2 - 1/4)\right) a_- + \sqrt{(l + \tfrac{1}{2} + M)(l + 1/2 - M)}\, b_- = 0$$

$$\Leftrightarrow \dots \Leftrightarrow \quad b_- = -a_- \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} - M}{l + \frac{1}{2} + M}}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} a_- = \mp \sqrt{\dfrac{l + 1/2 + M}{2l+1}} \\[2em] b_- = \pm \sqrt{\dfrac{l + 1/2 - M}{2l+1}} \end{cases}$$

On choisi :

$$a_- = \sqrt{\frac{l + 1/2 + M}{2l+1}}$$

$$b_- = -\sqrt{\frac{l + 1/2 - M}{2l+1}}$$

Donc les coef. Clebsch-Gordan

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle \quad \text{ou} \quad \langle l, s, m_l, m_s | J M \rangle$$

deviennent

$$\langle l, \tfrac{1}{2}, \underbrace{M \pm \tfrac{1}{2}}_{m_l}, \underbrace{\pm \tfrac{1}{2}}_{m_s} | \underbrace{l + \tfrac{1}{2}}_{J}, M \rangle = a_+ \text{ ou } b_+$$

pour λ_+

et $$\langle l, \tfrac{1}{2}, \underbrace{M \pm \tfrac{1}{2}}_{m_l}, \underbrace{\mp \tfrac{1}{2}}_{m_s} | \underbrace{l - \tfrac{1}{2}}_{J}, M \rangle = a_- \text{ ou } b_-$$

Alors on a trouvé les états propres de T, c'est-à-dire les états propre de la matrice J^2 qui sont

$\begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix}$ pour la valeur propre λ_+

et $\begin{pmatrix} a_- \\ b_- \end{pmatrix}$ pour la valeur propre λ_-

Donc les coef. Clebsch-Gordan qui connectent les vecteurs propres $|l, s, m_l, m_s\rangle$ et les vecteurs propres $|JM\rangle$ sont

• λ_+ $$|JM\rangle = a_+ |l m_l\rangle \otimes |s m_s\rangle + b_+ |l, m_l'\rangle \otimes |s, m_s'\rangle$$

$$\langle l, \tfrac{1}{2}, M \pm \tfrac{1}{2}, \pm \tfrac{1}{2} | l + \tfrac{1}{2}, M \rangle = \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} \pm M}{2l+1}}$$

• λ_- $$\langle l, \tfrac{1}{2}, M \pm \tfrac{1}{2}, \mp \tfrac{1}{2} | l - \tfrac{1}{2}, M \rangle = \pm \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} \pm M}{2l+1}}$$