Mécanique Quantique 1 —– CORRIGÉ

Séance d'exercices 6 : moment cinétique et spin 1/2

Exercice 1

On se rappelle que les relations de commutations des moments cinétiques sont les suivantes :

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

Calculons maintenant le produit vectoriel de **L** avec lui-même. Notez bien que puisque les vecteurs ne commutent pas, il faut respecter l'ordre dans la multiplication. Ainsi, quand vous calculer le déterminant des sous-matrices, il faut toujours multiplier d'abord l'élément de la deuxième ligne et ensuite celui de la troisième ligne :

$$\begin{aligned}
\mathbf{L} \times \mathbf{L} &= \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ L_x & L_y & L_z \\ L_x & L_y & L_z \end{vmatrix} \\
&= \hat{i}(L_y L_z - L_z L_y) - \hat{j}(L_x L_z - L_z L_x) + \hat{k}(L_x L_y - L_y L_x) \\
&= \hat{i}[L_y, L_z] - \hat{j}[L_x, L_z] + \hat{k}[L_x, L_y] \\
&= \hat{i} i\hbar L_x - \hat{j}(-i\hbar L_y) + \hat{k} i\hbar L_z \\
&= i\hbar \mathbf{L}
\end{aligned}$$

Exercice 2

Pour calculer le commutateur $[S^2, S_i]$, pour $i = x, y, z$, on se souvient que $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$. De plus, puisque le spin est un moment cinétique, on peut utiliser les commutateurs calculés à la section précédente. Commençons par calculer $[S^2, S_x]$:

$$\begin{aligned}
[S^2, S_x] &= [S_x^2 + S_y^2 + S_z^2, S_x] \\
&= [S_x^2, S_x] + [S_y^2, S_x] + [S_z^2, S_x] \\
&= S_x[S_x, S_x] + [S_x, S_x]S_x + S_y[S_y, S_x] + [S_y, S_x]S_y + S_z[S_z, S_x] + [S_z, S_x]S_z \\
&= 0 + 0 + S_y(-i\hbar S_z) + (-i\hbar S_z)S_y + S_z(i\hbar S_y) + (i\hbar S_y)S_z \\
&= 0
\end{aligned}$$

Par symétrie, on trouve également que $[S^2, S_y] = 0$ et $[S^2, S_z] = 0$. Cela signifie donc que S^2 commute avec chacune des composante de S et donc avec S lui-même.

Exercice 3

a)

De façon générale, voici comment les moments cinétiques S^2 et S_z agissent sur un état $|1/2, m\rangle$ (avec m=1/2 ou -1/2) :

$$S^2|1/2, m\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|1/2, m\rangle \qquad S_z|1/2, m\rangle = \hbar m|1/2, m\rangle$$

La représentation matricielle de S^2 est

$$\begin{aligned}
S^2 &= \begin{pmatrix} \langle 1/2,1/2|S^2|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,1/2|S^2|1/2,-1/2\rangle \\ \langle 1/2,-1/2|S^2|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,-1/2|S^2|1/2,-1/2\rangle \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \langle 1/2,1/2|\frac{3}{4}\hbar^2|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,1/2|\frac{3}{4}\hbar^2|1/2,-1/2\rangle \\ \langle 1/2,-1/2|\frac{3}{4}\hbar^2|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,-1/2|\frac{3}{4}\hbar^2|1/2,-1/2\rangle \end{pmatrix} \\
&= \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

et celle de S_z est

$$\begin{aligned}
S_z &= \begin{pmatrix} \langle 1/2,1/2|S_Z|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,1/2|S_Z|1/2,-1/2\rangle \\ \langle 1/2,-1/2|S_Z|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,-1/2|S_Z|1/2,-1/2\rangle \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \langle 1/2,1/2|\frac{\hbar}{2}|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,1/2|-\frac{\hbar}{2}|1/2,-1/2\rangle \\ \langle 1/2,-1/2|\frac{\hbar}{2}|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,-1/2|-\frac{\hbar}{2}|1/2,-1/2\rangle \end{pmatrix} \\
&= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Une autre façon de trouver la représentation matricielle de ces deux matrices est la suivante. On pose $S^2 = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ et on l'applique aux états $|1/2,1/2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ et $|1/2,-1/2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$:

$$S^2|1/2,1|2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|1/2,1|2\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad a = \frac{3}{4}\hbar^2 \text{ et } c = 0$$

$$S^2|1/2,-1|2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|1/2,-1|2\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} b \\ d \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad b = 0 \text{ et } d = \frac{3}{4}\hbar^2$$

et de même pour S_z.

b)

On sait que $S_\pm|1/2,m\rangle = \hbar\sqrt{(1/2 \mp m)(1/2 \pm m + 1)}|1/2, m \pm 1\rangle$ et donc la reprsentation matricielle de $S_\pm$ est

$$\begin{aligned}
S_+ &= \begin{pmatrix} \langle 1/2,1/2|S_+|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,1/2|S_+|1/2,-1/2\rangle \\ \langle 1/2,-1/2|S_+|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,-1/2|S_+|1/2,-1/2\rangle \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \langle 1/2,1/2|0|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,1/2|\hbar|1/2,1/2\rangle \\ \langle 1/2,-1/2|0|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,-1/2|\hbar|1/2,1/2\rangle \end{pmatrix} \\
&= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_- &= \begin{pmatrix} \langle 1/2,1/2|S_-|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,1/2|S_-|1/2,-1/2\rangle \\ \langle 1/2,-1/2|S_-|1/2,1/2\rangle & \langle 1/2,-1/2|S_-|1/2,-1/2\rangle \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \langle 1/2,1/2|\hbar|1/2,-1/2\rangle & \langle 1/2,1/2|0|1/2,-1/2\rangle \\ \langle 1/2,-1/2|\hbar|1/2,-1/2\rangle & \langle 1/2,-1/2|0|1/2,-1/2\rangle \end{pmatrix} \\
&= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Afin de trouver la représentation matricielle de $\mathbf{S}$, il suffit de connaître les représentions matricielles de S_x, S_y et S_z. La dernière est déjà connue, quant aux deux autres, il suffit d'utiliser le fait que

$$S_x = \frac{S_+ + S_-}{2} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad\qquad S_y = \frac{S_+ - S_-}{2i} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Ainsi,

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\hat{i} + \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\hat{j} + \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\hat{k} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x\hat{i} + \sigma_y\hat{j} + \sigma_z\hat{k})$$

où les σ_i sont les matrices de Pauli.

Exercice 4

a)

Pour ce qui est de S^2, puisque la matrice qui le représente est proportionnelle à la matrice identité, ses vecteurs propres sont $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ et $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Cherchons maintenant les vecteurs propres de S_u. Pour cela, on doit d'abord trouver la matrice qui le représente. Soit $\hat{u} = \sin\theta\cos\phi\hat{i} + \sin\theta\sin\phi\hat{j} + \cos\theta\hat{k}$ un vecteur untité d'orientation arbitraire, alors

$$\begin{aligned}
S_u &= \hat{u}\cdot\hat{S} \\
&= \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\phi\,\sigma_x + \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin\phi\,\sigma_y + \frac{\hbar}{2}\cos\theta\,\sigma_z \\
&= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\cos\phi - i\sin\theta\sin\phi \\ \sin\theta\cos\phi + i\sin\theta\sin\phi & -\cos\theta \end{pmatrix} \\
&= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Pour trouver les valeurs propres de S_u, on résout l'équation $det(S_u - \lambda I) = 0$. On trouve alors $\lambda_\pm = \pm\frac{\hbar}{2}$.

Pour trouver les vecteurs propres associés $v_\pm$ on résout le système matriciel $S_u v_\pm = \lambda_\pm v_\pm$. Pour la valeur propre positive, on obtient :

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad\Leftrightarrow\quad \begin{pmatrix} a\cos\theta + b\sin\theta e^{-i\phi} \\ a\sin\theta e^{i\phi} - b\cos\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{1}$$

$$\Leftrightarrow\quad \begin{cases} a\cos\theta + b\sin\theta e^{-i\phi} = a \\ a\sin\theta e^{i\phi} - b\cos\theta = b \end{cases} \tag{2}$$

$$\Rightarrow\quad \begin{cases} a = b\frac{e^{-i\phi}}{\sin\theta}(1+\cos\theta) \\ b \text{ quelconque} \end{cases} \tag{3}$$

$$\Rightarrow\quad |+\rangle_u = b\begin{pmatrix} \frac{e^{-i\phi}}{\sin\theta}(1+\cos\theta) \\ 1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

Notons que ceci est vrai seulement si $\sin\theta \neq 0$. Si $\sin\theta = 0$ et $\theta = 2k\pi$, a est quelconque et $b = 0$. Si toutefois, $\sin\theta = 0$ et $\theta = (2k+1)\pi$, b est quelconque et $a = 0$. Pour tenir compte de ces contraintes on peut choisir le vecteur propre unitaire suivant :

$$|+\rangle_u = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2)e^{i\phi} \end{pmatrix} = \cos(\theta/2)|\uparrow\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\phi}|\downarrow\rangle$$

En effet,

$$|+\rangle_u = b\begin{pmatrix}\frac{e^{-i\phi}}{\sin\theta}(1+\cos\theta)\\ 1\end{pmatrix} = b\begin{pmatrix}1+\cos\theta\\ \sin\theta e^{i\phi}\end{pmatrix} = b\begin{pmatrix}1+(2\cos(\theta/2)^2-1)\\ 2\sin(\theta/2)\cos(\theta/2)e^{i\phi}\end{pmatrix} = 2b\cos(\theta/2)\begin{pmatrix}\cos(\theta/2)\\ \sin(\theta/2)e^{i\phi}\end{pmatrix}$$

où encore, si on normalise le vecteur :

$$|+\rangle_u = \begin{pmatrix}\cos(\theta/2)\\ \sin(\theta/2)e^{i\phi}\end{pmatrix}$$

L'avantage d'écrire le vecteur propre sous cette forme permet de tenir compte du cas où $\sin\theta = 0$.

En suivant exactement la même méthode pour l'autre valeur propre, on trouve le deuxième vecteur propre :

$$|-\rangle_u = \begin{pmatrix}\sin(\theta/2)\\ -\cos(\theta/2)e^{i\phi}\end{pmatrix} = \sin(\theta/2)|\uparrow\rangle - \cos(\theta/2)e^{i\phi}|\downarrow\rangle$$

Puisque ces vecteurs propres sont des combinaisons linéaires des vecteurs propres de S^2, ce sont bien des vecteurs prorpes communs aux deux matrices.

b)

Notez d'abord que le résultat de la mesure est donné par les valeurs propres de l'opérateur que l'on mesure. Les probabilités elles sont calculée en prenant la norme au carré de notre état projeté sur l'états propre associé à la valeur propre. Voyons ça en calculs :

On cherche à mesurer l'état $|+\rangle_u = \cos(\theta/2)|\uparrow\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\phi}|\downarrow\rangle$. Si on mesure S_z, il y a deux résultats possible : $\hbar/2$ et $-\hbar/2$.

La probabilité de mesure $\hbar/2$ est donnée par

$$|\langle\uparrow|+\rangle_u|^2 = |\langle\uparrow(\cos(\theta/2)|\uparrow|\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\phi}|\downarrow\rangle)|^2 = |\cos(\theta/2)\langle\uparrow|\uparrow\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\phi}\langle\uparrow|\downarrow\rangle|^2 = \cos^2(\theta/2)$$

De la même façon, la probabilité de mesurer $-\hbar/2$ est donnée par

$$|\langle\downarrow|+\rangle_u|^2 = |\langle\downarrow(\cos(\theta/2)|\uparrow|\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\phi}|\downarrow\rangle)|^2 = |\cos(\theta/2)\langle\downarrow|\uparrow\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\phi}\langle\downarrow|\downarrow\rangle|^2 = \sin^2(\theta/2)$$

Notez que puisque $|+\rangle_u$ est écrit en fonction des vecteurs propres de S_z, si on mesure S_z sur l'état $|\uparrow\rangle$, on voit tout de suite que l'on obtient $\hbar/2$ avec une probabilité $\cos^2(\theta/2)$ et $-\hbar/2$ avec une probabilité $\sin^2(\theta/2)$. En effet, ces probabilités sont simplement la norme des constantes se trouvant en avant des états propres respectifs.

Si on mesure maintenant S_x, il est plus simple d'écrire le vecteur $|+\rangle_u$ en fonction des vecteurs propres de S_x. Pour cela, on diagonalise donc la matrice correspondant à S_x et on trouve les vecteurs propres suivants :

$$|\chi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\ \left(\text{valeur propre : }\frac{\hbar}{2}\right) \qquad \text{et} \qquad |\chi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\ \left(\text{valeur propre : }-\frac{\hbar}{2}\right)$$

Ainsi,

$$|+\rangle_u = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\cos(\theta/2)+\sin(\theta/2)e^{i\phi}\big)|\chi_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\cos(\theta/2)-\sin(\theta/2)e^{i\phi}\big)|\chi_-\rangle$$

Les valeurs propres de S_x sont ici aussi $\hbar/2$ et $-\hbar/2$. On obtiendra $\hbar/2$ avec une probabilité

$$|\frac{1}{\sqrt{2}}\big(\cos(\theta/2)+\sin(\theta/2)e^{i\phi}\big)|^2 = \frac{1}{2}\big(\cos(\theta/2)+\sin(\theta/2)e^{i\phi}\big)\big(\cos(\theta/2)+\sin(\theta/2)e^{-i\phi}\big) = \frac{1}{2}(1+\sin\theta\cos\phi)$$

De la même façon, on mesurera $-\hbar/2$ avec une probabilité

$$\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\big(\cos(\theta/2)-\sin(\theta/2)e^{i\phi}\big)\right|^2=\frac{1}{2}(1-\sin\theta\cos\phi)$$

Finalement, que se passe-t'il si on mesure S_z d'abord, puis S_x ? Mesurer d'abord S_z va donner comme mesure $\pm\hbar/2$, mais surtout cela va projeter l'état $|+\rangle_u$ dans un des états propre de S_z (celui associé à la valeur propre mesurée). Ensuite, si on veut connaitre le résultat des mesures de S_x, ce n'est plus l'états $|+\rangle_u$ qu'on mesure mais l'états propre de S_z ($|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$) dans lequel l'état initial se retrouve maintenant.

Si S_z nous donne $\hbar/2$ (probabilité $\cos^2(\theta/2)$) on se retrouve dans l'état $|\uparrow\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_+\rangle+|\chi_-\rangle)$. Alors, S_x nous donnera $\hbar/2$ et $-\hbar/2$ chacune avec un probabilité 1/2.

Si S_z nous donne $-\hbar/2$ (probabilité $\sin^2(\theta/2)$) on se retrouve dans l'état $|\downarrow\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_+\rangle-|\chi_-\rangle)$. Alors, S_x nous donnera $\hbar/2$ et $-\hbar/2$ chacun avec un probabilité 1/2.

Au final, pour connaître la probabilité totale d'une mesure, il faut multiplier les probabilités. Par exemple, la probabilité d'avoir $\hbar/2$ aussi bien pour S_z que pour S_x sera $\frac{1}{2}\cos^2(\theta/2)$.

Exercice 5

a)

$$H=\gamma\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}=\gamma\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\sigma_x & \sigma_y & \sigma_z\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}0\\0\\B\end{pmatrix}=\gamma\frac{\hbar}{2}B\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de l'hamiltonien sont $\pm\frac{\gamma B\hbar}{2}$ et ses vecteurs propres sont les états $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ (les mêmes vecteurs propres que S_z).

b)

L'état $|+\rangle_u$ est l'état propre trouvé à l'exercice précédent et on se souvient que

$$|+\rangle_u=\cos(\theta/2)|\uparrow\rangle+\sin(\theta/2)e^{i\phi}|\downarrow\rangle$$

.

De plus, on se souvient que de façon générale, un état propre de l'hamiltonien évolue de la façon suivante :

$$|\psi(t)\rangle=e^{-i\lambda t/\hbar}|\psi(0)\rangle$$

où λ est la valeur propre associée.

Ainsi, l'état $|+\rangle_u$ évolue comme

$$|+(t)\rangle_u=\cos(\theta/2)e^{-i\frac{\hbar}{2}\gamma Bt/\hbar}|\uparrow\rangle+\sin(\theta/2)e^{i\phi}e^{i\frac{\hbar}{2}\gamma Bt/\hbar}|\downarrow\rangle=e^{-i\frac{1}{2}\gamma Bt}\Big(\cos(\theta/2)|\uparrow\rangle+\sin(\theta/2)e^{i\phi}e^{i\gamma Bt}|\downarrow\rangle\Big)$$

On peut ignorer la phase globale et simplement dire que l'état évolue comme

$$|+(t)\rangle_u=\cos(\theta/2)|\uparrow\rangle+\sin(\theta/2)e^{i\phi}e^{i\gamma Bt}|\downarrow\rangle$$