Mécanique Quantique 1 —— CORRIGÉ

Séance d'exercices 8 : 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 $\mathbf{L}$ avec lui-même :

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

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,

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

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 :

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

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

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

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

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 :

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

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 :

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

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 :

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

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)

Puisque $|\uparrow\rangle_u = \cos(\theta/2)|\uparrow\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\phi}|\downarrow\rangle$ est écrit en fonction des vecteurs propres de S_z, si on mesure S_z sur l'état $|\uparrow\rangle_u$ on obtient $\hbar/2$ avec une probabilité $\cos^2(\theta/2)$ et $-\hbar/2$ avec une probabilité $\sin^2(\theta/2)$.

Si on mesure maintenant S_x, il est plus simple d'écrire le vecteur $|\uparrow\rangle_u$ 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, $|\uparrow\rangle_u = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\sin(\theta/2) + \cos(\theta/2)e^{i\phi}\big)|\chi_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\sin(\theta/2) - \cos(\theta/2)e^{i\phi}\big)|\chi_-\rangle$ et donc on obtiendra $\hbar/2$ avec une probabilité $|\frac{1}{\sqrt{2}}\big(\sin(\theta/2) + \cos(\theta/2)e^{i\phi}\big)|^2 = \frac{1}{2}(1 + \sin\theta\cos\phi)$ et $-\hbar/2$ avec une probabilité $\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\big(\sin(\theta/2) + \cos(\theta/2)e^{i\phi}\big)\right|^2 = \frac{1}{2}(1 - \sin\theta\cos\phi)$.

Finalement, si on mesure S_z d'abord, puis S_x, voyons les résultats qu'on obtient :
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 $-\hbar/2$ 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 $-\hbar/2$ 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 $|\uparrow\rangle_u$ est l'état propre trouvé à l'exercice précédent et on se souvient que

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

.

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 $|\uparrow\rangle_u$ évolue comme

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

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

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