Postulats et outils de base

S. Fumeron et S. Lebègue

Formation Ingénieur Civil des Mines 2$^{\text{ème}}$ année

Septembre 2022

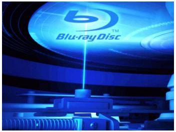
Plan

Les technologies quantiques

«Aujourd'hui, un tiers du PMB a à voir avec la mécanique quantique.» (S Glashow, Nobel 1979).

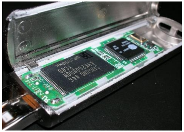
Aujourd'hui

Laser DVD



Microprocesseur

Clé USB



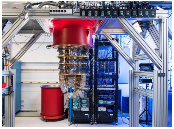
IRM

GPS

Train MagLev

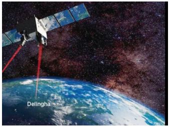
Demain

Ordinateur quantique



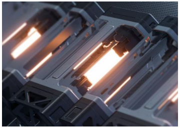
Google Sycamore (53 qubits)

Cryptographie quantique



Communication cryptée avec le satellite Micius (>1200 km)

Batterie quantique



Charge 200 fois plus rapide que la batterie classique

Domaine d'applicabilité

L'action caractéristique d'un système $\mathcal{S}$ est une grandeur physique fondamentale ayant la dimension :

$$[\mathcal{S}] = M.L^2.T^{-1} \tag{1}$$

C'est une énergie multipliée par une durée ou une quantité de mouvement multipliée par une longueur.

En physique quantique, l'action caractéristique vaut

$$\hbar = 1,05457181810^{-34} J.s \tag{2}$$

Lorsque $\mathcal{S} \gg \hbar$, on est dans un cadre classique, sinon un traitement quantique est indispensable.

Domaine d'applicabilité

Système	Données	Action
Voiture sur autoroute	$L = 4\text{m}$ $m = 1\text{t}$ $v = 130\text{km/h}$	$\mathcal{S} = 1,4.10^5 \gg \hbar$ Classique
Balle de 22 long rifle	$L = 2\text{cm}$ $m = 2\text{g}$ $v = 350\text{m/s}$	$\mathcal{S} = 1,4.10^{-2} \gg \hbar$ Classique
Laser He-Ne	$\lambda = 633\text{nm}$ $P = 2\text{mW}$	$\mathcal{S} = 8,9.10^{-33} \gtrsim \hbar$ Quantique
Electron dans un atome	$\lambda = 100\text{nm}$, $E = 10\text{eV}$	$\mathcal{S} = 5,3.10^{-34} \approx \hbar$ Quantique

Etats quantiques

Postulat 1 : L'espace des configurations d'un système physique est un espace de Hilbert complexe $\mathbf{E}_H$. L'état du système est totalement défini à chaque instant par un ket normé $|\psi\rangle$ de cet espace.

Quelques propriétés importantes des kets d'état :

- *Normalisation* : Le produit du ket avec son vecteur dual (ou conjugué hermitique) appelé bra et noté $\langle\psi|$ vaut $\langle\psi|\,\psi\,\rangle = 1$.
- *Principe de superposition* : Toute combinaison linéaire de kets constitue donc un état accessible pour le système. C'est une conséquence de la structure de $\mathbf{E}_H$.
- *Interférences* : Les coefficients de la combinaison sont des nombres complexes, donc les termes de la combinaison linéaire peuvent présenter des déphasages les uns vis-à-vis des autres.

Observables

Postulat 2 : A toute grandeur physique mesurable a est associée un opérateur linéaire hermitien $\hat{A}$ agissant dans $\mathbf{E}_H$. Cet opérateur est appelé une observable.
Postulat 3 : Les seuls résultats possibles de la mesure de a sont les valeurs propres $\{a_n\}$ de l'observable $\hat{A}$.

Le postulat 3 impose l'hermiticité des observables car les résultats de mesures sont toujours des valeurs réelles.

Un premier exemple d'observable est l'observable position $\hat{\mathbf{r}}$, dont les composantes $\hat{x}$,$\hat{y}$ et $\hat{z}$ ont les kets $|\,\mathbf{r}\,\rangle$ pour vecteurs propres :

$$\hat{x}\,|\,\mathbf{r}\,\rangle = x\,|\,\mathbf{r}\,\rangle \tag{3}$$
$$\hat{y}\,|\,\mathbf{r}\,\rangle = y\,|\,\mathbf{r}\,\rangle \tag{4}$$
$$\hat{z}\,|\,\mathbf{r}\,\rangle = z\,|\,\mathbf{r}\,\rangle \tag{5}$$

Fonction d'onde

Le théorème de Riesz permet de passer de décomposer tout ket $|\psi\rangle$ sur la base $|\,\mathbf{r}\,\rangle$:

$$|\psi\rangle = \int d^3r\ |\,\mathbf{r}\,\rangle\langle\,\mathbf{r}\,|\psi\rangle \tag{6}$$

Les coefficients de la combinaison linéaire définissent la fonction d'onde en chacun des points $\mathbf{r} = (x, y, z)$ et à l'instant t :

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}, t) = \langle\,\mathbf{r}\,|\,\psi(t)\,\rangle} \tag{7}$$

En pratique, on considèrera toute fonction d'onde comme élément d'un espace de Schwartz, i.e. de classe C^∞ et à décroissance rapide (elles décroissent plus vite que tout polynôme en l'infini).

Signification de la fonction d'onde

Dans l'interprétation de Born, la fonction d'onde est reliée à la densité de probabilité de présence $\rho(\mathbf{r}, t)$ d'une particule au point $\mathbf{r}$ et à l'instant t :

$$\boxed{d^3\mathcal{P} = \rho(\mathbf{r}, t) d^3 r \quad \text{où} \quad \rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2} \tag{8}$$

Le sens physique de la fonction d'onde est donc une amplitude de probabilité de présence : c'est une interprétation statistique qui fait aujourd'hui consensus, mais il en existe d'autres comme l'onde-pilote de Bohm et De Broglie...

Observable impulsion

Un deuxième exemple d'observable important en pratique est l'impulsion $\hat{\mathbf{p}}$, dont les composantes $\hat{p}_x$,$\hat{p}_y$ et $\hat{p}_z$ ont les kets $|\, \mathbf{p}\, \rangle$ pour vecteurs propres :

$$\hat{p}_x \,|\, \mathbf{p}\, \rangle = p_x \,|\, \mathbf{p}\, \rangle \tag{9}$$

$$\hat{p}_y \,|\, \mathbf{p}\, \rangle = p_y \,|\, \mathbf{p}\, \rangle \tag{10}$$

$$\hat{p}_z \,|\, \mathbf{p}\, \rangle = p_z \,|\, \mathbf{p}\, \rangle \tag{11}$$

Cet opérateur est conjugué avec l'observable position

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{12}$$

En représentation position, son action sur un ket $|\psi\rangle$ est

$$\langle\, \mathbf{r}\,|\,\hat{\mathbf{p}}\,|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}\,\langle\, \mathbf{r}\,|\psi\rangle \tag{13}$$

Résultats de mesure

Postulat 4 : Pour un système dans l'état $|\psi\rangle$, la probabilité d'obtenir comme résultat de la mesure de a la valeur a_n est

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \left|\langle\psi|\, \psi_n^i\rangle\right|^2 = \langle\psi|\, \hat{P}_n \,|\psi\rangle \tag{14}$$

Postulat 5 (réduction du paquet d'onde) : Immédiatement après la mesure de a ayant donné la valeur a_n, l'état du système est la projection normée de $|\psi\rangle$ sur le sous-espace propre associé à a_n [a] :

$$\frac{\hat{P}_n \,|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\, \hat{P}_n \,|\psi\rangle}} = \frac{\hat{P}_n \,|\psi\rangle}{\sqrt{\mathcal{P}(a_n)}} \tag{15}$$

a. Si la valeur propre est non-dégénérée, cet état est simplement $|\, \psi_n \,\rangle$.

Résultats de mesure

Dans les expressions précédentes, l'opérateur défini par

$$\hat{P}_n = \sum_{i=1}^{g_n} \left|\psi_n^i\right\rangle \left\langle\psi_n^i\right| \tag{16}$$

est le projecteur sur le sous-espace propre de a_n. Il est hermitique mais ce n'est pas une observable. Il possède la propriété $\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$.

Les deux conséquences essentielles de ces postulats de mesure sont :

- Le processus de mesure n'est pas déterministe (comme en physique classique) mais probabiliste.
- La mesure d'un système quantique ne correspond plus à la lecture passive de données préexistantes : il s'agit d'un processus actif qui modifie le système.

Evolution quantique

Postulat 6 : Soit $|\psi(t)\rangle$ l'état du système à un instant t, tant que le système n'est soumis à aucune observation, son évolution est régie par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \qquad (17)$$

Le Hamiltonien $\hat{H}$ est l'observable associée à l'énergie du système :

$$\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle \qquad (18)$$

Les états propres du Hamiltonien, appelés états stationnaires, forment une base très utile de l'espace des états :

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n e^{-iE_n/\hbar t}|E_n\rangle \qquad (19)$$

Un vecteur d'état évolue donc de façon déterministe en dehors de tout processus de mesure.

Equation de Schrödinger

Pour une particule plongée dans un potentiel scalaire $V(\mathbf{r})$, l'opérateur Hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2 + U(\hat{\mathbf{r}}) \qquad (20)$$

En représentation position

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\, \mathbf{r}\,|\psi\rangle = \langle\, \mathbf{r}\,|\,\hat{H}\,|\psi\rangle = \frac{1}{2m}\langle\, \mathbf{r}\,|\,\hat{\mathbf{p}}^2\,|\psi\rangle + \langle\, \mathbf{r}\,|\,U(\hat{\mathbf{r}})\,|\psi\rangle$$

Or, en utilisant (13), on a :

$$\langle\, \mathbf{r}\,|\,\hat{\mathbf{p}}\,|\,\hat{\mathbf{p}}\,|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\nabla\langle\, \mathbf{r}\,|\,\hat{\mathbf{p}}\,|\psi\rangle = -\hbar^2\Delta\langle\, \mathbf{r}\,|\psi\rangle$$

On retrouve l'équation obtenue par Erwin Schödinger en 1925

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r},t)} \qquad (21)$$

Valeur moyenne

Pour un système dans l'état $|\psi\rangle$, la valeur moyenne $\langle\, \hat{A}\, \rangle$ de l'observable $\hat{A}$ est définie par l'élément de matrice :

$$\langle\, \hat{A}\, \rangle = \langle\psi|\, \hat{A}\, |\psi\rangle \tag{22}$$

Physiquement, cette grandeur représente l'ordre de grandeur de a lorsque le système est dans l'état $|\psi\rangle$.

Exemple : la position moyenne selon x d'une particule dans l'état $|\psi\rangle$ s'écrit

$$\begin{aligned} \langle\, \hat{x}\, \rangle &= \langle\psi|\, \hat{x}\, |\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, \langle\psi|\, x\, \rangle\, \langle x|\, \hat{x}\, |\psi\rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi(x,t)^* \, x\, \psi(x,t) = \int_{\mathbb{R}} dx\, x\rho(x,t) \end{aligned}$$

Théorème d'Ehrenfest

Comment évolue la valeur moyenne d'une grandeur physique au cours du temps ?

$$\frac{d}{dt}\langle\, \hat{A}\,\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\, [\,\hat{A},\hat{H}\,]\,\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \tag{23}$$

Même si l'observable $\hat{A}$ ne dépend pas explicitement du temps, sa valeur moyenne peut évoluer dans le temps si $\hat{A}$ et $\hat{H}$ ne commutent pas.
Si $\hat{A}$ ne dépend pas explicitement du temps et commute avec $\hat{H}$, la valeur moyenne $\langle\, \hat{A}\,\rangle$ n'évolue pas au cours du temps : $\hat{A}$ est alors appelée constante du mouvement
$\Rightarrow$ Comme $\hat{H}$ commute avec lui-même, si $\hat{H}$ ne dépend pas de t ("système conservatif"), alors son énergie est une constante du mouvement.

Inégalité d'Heisenberg

La valeur moyenne indique l'ordre de grandeur de a, mais elle ne contient aucune information sur la dispersion des résultats autour de cette valeur lors de mesures réelles.

Pour cela, il faut utiliser une autre grandeur statistique, l'écart-type :

$$\Delta a = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2} \tag{24}$$

Soit $|\psi\rangle$ l'état du système, on considère deux grandeurs a et b que l'on cherche à mesurer. Soient $\hat{A}$ et $\hat{B}$ les observables correspondantes, alors les écarts quadratiques Δa et Δb vérifient l'inégalité :

$$\Delta a \Delta b \geq \frac{1}{2} \left| \langle\psi| [\hat{A}, \hat{B}] |\psi\rangle \right| \tag{25}$$

Inégalités d'Heisenberg position-impulsion

Pour le couple d'observables $(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$, l'inégalité précédente et le commutateur (12) donnent

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \tag{26}$$

Tous les autres jeux de variables donnent un second membre nul.

Dans la pratique, un système quantique dans son état fondamental est tel que le produit $\Delta x \Delta p_x$ a comme ordre de grandeur :

$$\Delta x \Delta p_x \approx \hbar$$

Relation taille-énergie

On considère un système constitué d'une particule (masse m) placée dans un puit infini de taille L. Dans le repère du centre de masse, l'écart quadratique en position est $\Delta x \approx L$ et l'écart quadratique en impulsion est

$$\Delta p^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle = 3 \langle \hat{p}_x^2 \rangle = 3\, \Delta p_x^2 \approx \frac{3\hbar^2}{L^2}$$

L'énergie moyenne du système est donc

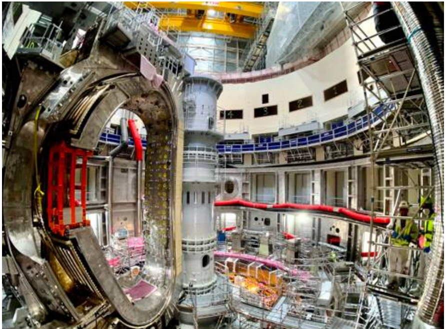
$$\langle E \rangle = \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{2m} \approx \frac{3\hbar^2}{2mL^2} \tag{27}$$

Plus un système quantique est confiné, plus son énergie est grande ("pression d'Heisenberg" $\mathrm{P}_H = \langle E \rangle / L^3$).

Relation taille-énergie

Quelques conséquences :

- Stabilité de la matière, superfluidité de l'hélium...
- Réactions chimiques : $L \approx$ quelques Å $\Rightarrow \langle E \rangle \approx$ eV.
  Ex : Combustion du butane $C_4H_{10} = 2600$ kJ/mol soit environ 27 eV.
- Réactions nucléaires : $L \approx$ quelques fm $\Rightarrow \langle E \rangle \approx$ MeV.
  Ex : Fusion deutérium-tritium (ITER) = 17.6 MeV.



Inégalité d'Heisenberg temps-énergie

Il existe une quatrième inégalité de Heisenberg qui relie l'écart quadratique sur l'énergie ΔE à l'intervalle de temps Δt :

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \tag{28}$$

Comme le temps est un paramètre et ne possède pas d'observable associée, cette inégalité a un statut différent de (26). On la démontre grâce au théorème d'Ehrenfest :

$$\Delta a \Delta E \geq \frac{1}{2} \left| \langle\, [\, \hat{A}, \hat{H}\,]\, \rangle \right| = \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle\, \hat{A}\, \rangle \right|$$

Or, le temps caractéristique d'évolution Δt_a de $\langle\, \hat{A}\, \rangle$ est

$$\Delta t_a = \frac{\Delta a}{\left| \frac{d}{dt} \langle\, \hat{A}\, \rangle \right|}$$

Inégalité d'Heisenberg temps-énergie

Pour chacune des variables du système correspondant à une observable ne dépendant pas explicitement du temps, on peut donc définir un temps caractéristique d'évolution.

Le plus petit d'entre eux, Δt, est caractéristique des variations du système quantique et il vérifie donc nécessairement (28).

Quelques conséquences :

- Durée de vie d'un état stationnaire : $|\psi_n\rangle = e^{-iE_n/\hbar t}\,|E_n\rangle$

$$\begin{aligned} \langle\, E \,\rangle^2 &= \langle\psi_n|\,\hat{H}\,|\psi_n\rangle^2 = E_n^2 && (29)\\ \langle\, E^2 \,\rangle &= \langle\psi_n|\,\hat{H}^2\,|\psi_n\rangle = E_n^2 && (30)\end{aligned}$$

Donc $\Delta E = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta t \to +\infty$: une fois que le système est dans un état stationnaire, il y a reste indéfiniment.

Inégalité d'Heisenberg temps-énergie

- Largeur naturelle de raie : Un atome porté dans un état excité n'est pas dans un état stationnaire et il repasse dans l'état fondamental au bout d'un temps moyen τ appelé durée de vie moyenne de l'état excité.
  Le photon émis lors de ce processus présente alors une largeur de raie naturelle due à l'inégalité temps-énergie :

$$\tau \Delta E \approx \hbar \quad \Rightarrow \quad \Delta\lambda \approx \frac{\lambda^2}{2\pi c}\frac{1}{\tau} \tag{31}$$

  En pratique, la largeur d'une raie d'émission est toujours plus grande que sa largeur naturelle en raison de processus comme l'élargissement Doppler thermique, les collisions entre atomes d'un gaz...

Inégalité d'Heisenberg temps-énergie

Le traitement exact (électrodynamique quantique) donne pour une transition d'un niveau q vers un niveau p :

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2\pi c} A_{qp} \tag{32}$$

A_{qp}=coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée. Cette expression est en accord avec l'estimation (31).

Exemple : transition 4p-4s du Fer à $\lambda = 373,49$ nm

$$EDQ : A_{qp} = 0,902.10^8\ s^{-1} \quad \Rightarrow \quad \Delta\lambda = 6,7.10^{-6}\ nm$$
$$Heisenberg : \tau \approx 10ns \quad \Rightarrow \quad \Delta\lambda \approx 7,4.10^{-6}\ nm$$

Moment cinétique orbital

En mécanique classique, un mouvement de rotation produit un moment cinétique égal à

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \tag{33}$$

En représentation position, cela conduit à l'observable moment cinétique orbital

$$\hat{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i}\hat{\mathbf{r}}\times\boldsymbol{\nabla} = -i\hbar\begin{pmatrix} y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \\ z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \\ x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} = -i\hbar\begin{pmatrix} -\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi} \\ \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial\phi} \end{pmatrix} \tag{34}$$

Cet opérateur est hermitien et vérifie les relations de commutation :

$$[\,\hat{L}_x, \hat{L}_y\,] = i\hbar\hat{L}_z \tag{35}$$
$$[\,\hat{L}_y, \hat{L}_z\,] = i\hbar\hat{L}_x \tag{36}$$
$$[\,\hat{L}_z, \hat{L}_x\,] = i\hbar\hat{L}_y \tag{37}$$

Moment cinétique orbital

Les opérateurs $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$ commutent :

$$[\,\hat{L}^2, \hat{L}_z\,] = i\hbar[\,\hat{L}_x^2, \hat{L}_z\,] + i\hbar[\,\hat{L}_y^2, \hat{L}_z\,] = 0 \tag{38}$$

C'est une conséquence des relations de commutation précédente

$$\begin{aligned}
\left[\hat{L}_y^2, \hat{L}_z\right] &= \hat{L}_y^2\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y^2 = \hat{L}_y^2\hat{L}_z + \left(i\hbar\hat{L}_x - \hat{L}_y\hat{L}_z\right)\hat{L}_y \\
&= \hat{L}_y\left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] + i\hbar\hat{L}_x\hat{L}_y = i\hbar(\hat{L}_y\hat{L}_x + \hat{L}_x\hat{L}_y) \\
\left[\hat{L}_x^2, \hat{L}_z\right] &= -i\hbar(\hat{L}_y\hat{L}_x + \hat{L}_x\hat{L}_y)
\end{aligned}$$

Théorème : Si deux observables commutent, on peut construire une base orthonormée de l'espace des états constituée par des vecteurs propres communs.

Etats propres

On note $|l, m\rangle$ la base commune de kets propres pour $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$. Les équations aux valeurs propres sont données par :

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle \qquad l \in \mathbb{N} \tag{39}$$

$$\hat{L}_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle \qquad -l \leq m \leq l \tag{40}$$

l est un entier appelé nombre quantique orbital (ou secondaire) et m est un entier relatif appelé nombre quantique magnétique.
Les fonctions d'onde propres associées sont les harmoniques sphériques :

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} P_l^m(\theta) \tag{41}$$

Les $P_l^m(\theta)$ sont les fonctions de Legendre.

Etats propres

l	m	$Y_l^m(\theta,\phi)$
0	0	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
1	0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$
1	±1	$\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\exp\{\pm i\phi\}$
2	0	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)$
2	±1	$\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\exp\{\pm i\phi\}$
2	±2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\exp\{\pm 2i\phi\}$

$Y_0^0(\theta)$

$Y_1^0(\theta)$

$Y_2^0(\theta)$

Moment cinétique de spin

L'expérience de Stern et Gerlach (1922) puis l'hypothèse d'Uhlenbeck et Goudsmit (1925) ont conduit à postuler pour l'électron l'existence d'un moment cinétique non orbital pouvant être non entier : le spin.

Postulat 7 : Les relations de commutation auxquelles obéissent les composantes de l'observable spin $\hat{\mathbf{S}}$ sont les relations de commutation canoniques d'un moment cinétique (35)-(37) :

$$[\,\hat{S}_x, \hat{S}_y\,] = i\hbar\hat{S}_z \tag{42}$$

$$[\,\hat{S}_y, \hat{S}_z\,] = i\hbar\hat{S}_x \tag{43}$$

$$[\,\hat{S}_z, \hat{S}_x\,] = i\hbar\hat{S}_y \tag{44}$$

Moment cinétique de spin

Postulat 8 : les opérateurs de spin agissent dans un nouvel espace, l'espace des états de spin, dans lequel $\hat{S}^2$ et $\hat{S}_z$ forment un ECOC. On peut définir une base $|s, m_s\rangle$ des états de spin à partir des états propres communs de $\hat{S}^2$ et $\hat{S}_z$. Ils vérifient les équations aux valeurs propres :

$$\hat{S}^2 |s, m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle \qquad s = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}... \qquad (45)$$

$$\hat{S}_z |s, m_s\rangle = m_s \hbar |s, m_s\rangle \qquad -s \leq m_s \leq s \qquad (46)$$

Toutes les particules de spin demi-entier comme l'électron, les quarks, les neutrinos... sont appelées des fermions. Toutes les particules de spin entier comme le photon, les gluons... sont appelées des bosons.

Représentation matricielle du spin 1/2

L'espace des états de spin 1/2 est de dimension 2. Une base de cet espace est $\{|+\rangle, |-\rangle\} = \{|s = 1/2, m_s = 1/2\rangle, |s = 1/2, m_s = -1/2\rangle\}$. Dans cette base, on peut représenter l'observable spin à l'aide des trois matrices de Pauli :

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \tag{47}$$

avec $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{48}$$

Composition de spins 1/2

Que se passe-t-il lorsque l'on considère un système composé de deux particules de spin 1/2 ? Soient $\hat{\mathbf{S}}_1$ et $\hat{\mathbf{S}}_2$ les opérateurs de spin de chaque particule. L'espace des états d'un tel système est l'espace produit tensoriel $\mathbf{E}_{spin} = \mathbf{E}_{spin1} \otimes \mathbf{E}_{spin2}$, espace de dimension 4 dont une base orthonormée est donnée par :

$$\begin{aligned} \{|s_1; s_2\rangle\} &= \{|s_1 = \pm\rangle \otimes |s_2 = \pm\rangle\} \\ &= \{|+;+\rangle, |+;-\rangle, |-;+\rangle, |-;-\rangle\} \end{aligned} \tag{49}$$

L'action de $\hat{S}_{1z}$ et de $\hat{S}_{2z}$ sur ces kets de base est

$$\hat{S}_{1z}|s_1; s_2\rangle = s_1 \frac{\hbar}{2} |s_1; s_2\rangle \tag{50}$$

$$\hat{S}_{2z}|s_1; s_2\rangle = s_2 \frac{\hbar}{2} |s_1; s_2\rangle \tag{51}$$

Composition de spins 1/2

Remarque : En toute rigueur, il faudrait écrire non pas $\hat{S}_{1z}$ mais $\hat{S}_{1z} \otimes \hat{I}_2$, non pas $\hat{S}_{2z}$ mais $\hat{I}_1 \otimes \hat{S}_{2z}$...

$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ est un opérateur tel que

$$\hat{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \hat{\mathbf{S}}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{52}$$

Comme ils commutent, il existe une base commune qui les diagonalise. Dans cette base, $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ a toutes les bonnes propriétés attendues pour un moment cinétique.

Composition de spins 1/2

Les valeurs possibles de spin total S pour un ensemble formé de deux particules de spin 1/2 sont 0 et 1. A chacune de ces valeurs sont associées $2S+1$ valeurs de M comprises entre $-S$ et S :

- le sous-espace propre associé à $S=0$ correspond à l'état singulet :

$$|0; M=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+;-\rangle - |-;+\rangle) \tag{53}$$

- le sous-espace propre associé à $S=1$ correspond aux états triplets :

$$\begin{aligned} |1; M=1\rangle &= |+;+\rangle && (54) \\ |1; M=0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+;-\rangle + |-;+\rangle) && (55) \\ |1; M=-1\rangle &= |-;-\rangle && (56) \end{aligned}$$

Espace produit

Postulat 9 : l'espace des états de la particule quantique est $\mathbf{E}_{externe} \otimes \mathbf{E}_{spin}$, produit tensoriel entre l'espace de Hilbert de dimension infinie lié aux degrés de liberté externe, $\mathbf{E}_{externe}$, et l'espace de Hilbert de dimension finie $\mathbf{E}_{spin}$.

Dans ce cas, les vecteurs de base de l'espace des états sont de la forme : $|\psi\rangle \otimes |s, m_s\rangle$. Pour des particules de spin 1/2, le produit tensoriel entre l'espace de Hilbert de dimension infinie lié aux degrés de liberté externe, $\mathbf{E}_{externe}$, et de l'espace de Hilbert de dimension 2, $\mathbf{E}_{spin}$. Tout ket d'état $|\psi\rangle$ s'écrit donc :

$$|\psi\rangle = |\ \psi_+\ \rangle \otimes |+\rangle + |\ \psi_-\ \rangle \otimes |-\rangle \tag{57}$$

Spineur

En représentation position, la dégénérescence liée au spin $1/2$ impose d'utiliser deux fonctions d'onde différentes (une pour chaque valeur de m_s).

Suivant la terminologie de Cartan, l'état complet d'une particule sera donc défini par une fonction d'onde à deux composantes ou spineur, défini par :

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}, t) \\ \psi_-(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\, \mathbf{r} \mid \psi_+ \,\rangle \\ \langle\, \mathbf{r} \mid \psi_- \,\rangle \end{pmatrix} \tag{58}$$

C'est ce qu'il faut en toute rigueur utiliser dès que l'on tient compte du spin (équation de Pauli-Schrödinger) mais on peut aller beaucoup plus loin...

TD d'application : L'atome d'hydrogène