Chapitre 4
Moment cinétique et spin

Introduction

Le moment cinétique est fondamental à la physique atomique. Bien évidemment, sa description dans le cadre quantique doit se faire en termes d'opérateurs et non en termes de quantités liées à une trajectoire et les règles de commutation canoniques entraînent une quantification du moment cinétique. On peut utiliser le principe de correspondance pour construire un équivalent quantique au moment cinétique classique $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ mais le plus surprenant est que la mécanique quantique autorise l'existence de moments cinétiques sans équivalents classiques qu'on appelle "spin" (dont l'existence est justifiée par la relativité restreinte). Ce dernier est nécessaire à l'interprétation des résultats de spectroscopie et de magnétisme.

4.1 Moment cinétique

4.1.1 Un degré de liberté supplémentaire : le spin

Voir section 1.3.1. [LeBellac p.83]

4.1.2 Construction d'une base

Avant de s'intéresser au propriétés d'un moment cinétique en mécanique quantique nous devons préciser comment l'on construit une base commune à plusieurs observables en mécanique quantique. Si deux observables $\hat{A}$ et $\hat{B}$ commutent, il existe une base de l'espace de Hilbert formée de vecteurs propres communs à $\hat{A}$ et $\hat{B}$ (et l'on peut généraliser au cas de trois observables commutant etc). Dit autrement, si deux observables commutent, elles peuvent être diagonalisées en même temps. Jusqu'à maintenant nous avons utilisé cette règle de manière implicite, par exemple

— si l'on considère une particule libre : $\hat{H} = \frac{p^2}{2m}$, commute avec p l'opérateur impulsion. Cela justifie qu'on ait utilisé les ondes planes, vecteurs propres de p, comme base.

— Dans le cas d'un potentiel V présentant une symétrie, par exemple $V(x) = V(-x)$, on a cherché une solution présentant la même symétrie, c'est à dire vecteur propre de l'opérateur de symétrie S qui commute avec $\hat{H}$.

— Si l'on peut séparer le hamiltonien $\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y$ en deux parties qui commutent (comme c'est la cas pour un OH à 2D) alors on peut chercher séparément les valeurs et vecteurs propres de $\hat{H}_x$ et $\hat{H}_y$ et les valeurs propres de $\hat{H}$ seront les sommes de celles-ci et les vecteurs propres les produits (tensoriels en MQ, produit de fonctions en mécanique ondulatoire) de ceux de $\hat{H}_x$ et $\hat{H}_y$.

Ce théorème va être d'une grande importance pratique pour l'étude du moment cinétique.

[Basdevant Ch. 7 p. 158]

4.1.3 Définition du moment cinétique

En mécanique classique, le moment cinétique par rapport à l'origine du repère est donné par

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \ . \tag{4.1}$$

On utilise le principe de correspondance pour proposer la forme

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \ , \tag{4.2}$$

(on remplace la notation $\vec{v}$ par $\mathbf{v}$ pour alléger). On a alors les relations de commutation

$$[\hat{L_i}, \hat{L_j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L_k} \ , \tag{4.3}$$

avec le symbole de Levi-Civita ϵ_{ijk}, relation qu'on résume encore par

$$\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar\hat{\mathbf{L}} \ . \tag{4.4}$$

Pour un ensemble de N particules, on peut écrire le moment cinétique total

$$\hat{\mathbf{L}}^{\mathrm{tot}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{L}}_i \ , \tag{4.5}$$

qui respecte les relations de commutation de l'Eq. 4.3. On peut poser une définition générale d'un moment cinétique comme un opérateur $\hat{\mathbf{J}}$ respectant

$$\hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}} = i\hbar\hat{\mathbf{J}} \ . \tag{4.6}$$

[Basdevant Ch. 10, Le Bellac Ch. 10]

4.1.4 Propriétés et quantification du moment cinétique

On peut montrer la relation de commutation

$$[\hat{J}^2, \hat{\mathbf{J}}] = 0 \ . \tag{4.7}$$

c'est-à-dire que que $\hat{J}^2$ commute avec toute composante de $\hat{\mathbf{J}}$ et qu'on va pouvoir construire une base commune à $\hat{J}^2$ et (typiquement) $\hat{J}_z$ (c'est le choix le plus fréquent : on choisit alors l'axe z comme direction de quantification). On définit donc la base $\{|j,m\rangle\}$ telle que

$$\begin{aligned}
\hat{J}^2 \, |j,m\rangle &= j(j+1)\hbar^2 \, |j,m\rangle \ , \\
\hat{J}_z \, |j,m\rangle &= m\hbar \, |j,m\rangle \ , \\
\langle j', m' | j, m\rangle &= \delta_{j,j'}\delta_{m,m'} \ ,
\end{aligned} \tag{4.8}$$

avec les vp $j(j+1)$ puisque les vp de $\hat{J}^2$ sont forcément réelles et positives, et donc peuvent s'écrire sous cette forme.

Rq : on a ici un ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC), c'est à dire que la donnée de j et m détermine complètement et de manière unique l'état quantique $|j,m\rangle$ du système [Basdevant Ch. 7 p. 158].

On peut alors montrer à l'aide des relations de commutation canoniques (Eq. 4.6) plusieurs propriétés des nombres quantiques j et m (que nous démontrerons peut-être en TD, sinon voir [Basdevant Ch. 10]) :

- $-j \leq m \leq j$,
- le couple (j,m) ne peut être qu'un couple d'entiers ou de demi-entiers,

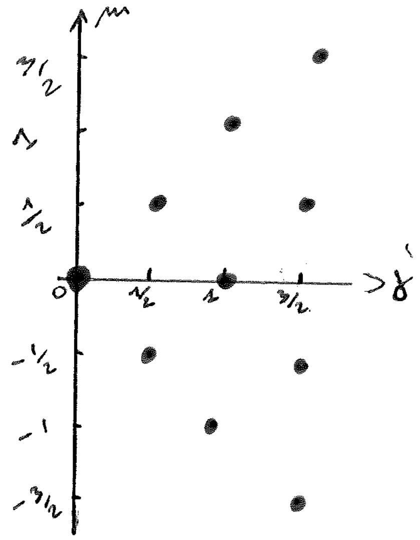

Figure 4.1 – Valeurs autorisées pour les couples (j, m) de nombres quantiques d'un moment cinétique.

ce que l'on peut résumer par le diagramme de la figure 4.1. Un moment cinétique en MQ est donc quantifié et cela d'une manière bien particulière. Si l'on prépare un système dans l'état $|j, m\rangle$, on fixe exactement le résultat de la mesure de J_z et J^2. Qu'en est-il de J_x et J_y ? Le résultat est forcément nul en moyenne, $\langle J_{x/y}\rangle = 0$, puisqu'on a préparé l'orientation du moment selon z. Par contre, on peut vérifier que

$$\Delta J_x = \Delta J_y = \hbar\sqrt{(j(j+1)+m^2)/2}\ ,$$

$$\Delta J_x \Delta J_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle J_z\rangle|\ , \tag{4.9}$$

il y a une incertitude intrinsèque à cette mesure (cela découle directement de la relation d'incertitude d'Heisenberg généralisée du chapitre précédent). Si $\langle \hat{J}_z\rangle = 0$, on a une information minimale sur J_z, donc on peut avoir $\Delta J_x = 0$ ou $\Delta J_y = 0$. Mais plus on a d'information sur J_z, plus la borne inférieur sur $\Delta J_x \Delta J_y$ est grande.

4.1.5 Cas du moment cinétique orbital

Toutes les propriétés précédentes sont vraies pour le moment cinétique orbital $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$. Toutefois, on va montrer que dans ce cas seule les valeurs entières de ℓ sont autorisées, avec $|\ell, m\rangle$ les $\vec{vp}$. Pour cela, on réécrit l'opérateur

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\ , \tag{4.10}$$

en coordonnées sphériques

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \phi}\ . \tag{4.11}$$

Alors, la fonction d'onde correspondant aux $\vec{vp}$ et vp $m\hbar$ est de la forme

$$\psi_m(\vec{r}) = \Phi(r,\theta)e^{im\phi}\ . \tag{4.12}$$

Cela implique que

$$e^{im\phi} = e^{im(\phi+2\pi)} \implies e^{im2\pi} = 1\ , \tag{4.13}$$

et donc m est entier, et par conséquent ℓ aussi.

Rq : les coordonnées sphériques sont très utiles pour calculer les fonctions propres communes à $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$, les harmoniques sphériques $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$, dont les formes tarabiscotées peuplent nos souvenirs de physique atomique. [Basdevant Ch.10 et 11]

A quoi correspondent donc les valeurs demi-entières autorisées par la MQ puisqu'elles ne peuvent par être reliées à un moment cinétique orbital ? Nous verrons plus loin qu'elles ne sont pas simplement un artefact mathématique, mais au contraire décrivent un objet sans équivalent classique qui a résolu bien des problèmes d'interprétation expérimentale : le spin.

4.1.6 Moment cinétique et moment magnétique

Facteur gyromagnétique

On a vu dans la section 1.3.1 qu'au moment cinétique orbital d'une particule de charge q on pouvait associer un moment magnétique

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{L} \ , \tag{4.14}$$

où $\gamma = \frac{q}{2m_q}$ est le facteur gyromagnétique. On est donc porté à poser la même relation en MQ

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma \hat{\mathbf{L}} \ , \tag{4.15}$$

associé à l'énergie dans un champ magnétique

$$\hat{H}_M = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \vec{B} \ . \tag{4.16}$$

[Basdevant Ch. 10 p 219, Le Bellac Ch. 10]

Effet Zeeman

Cette description permet l'interprétation de l'effet Zeeman. Soit une particule chargée (un électron) dans un potentiel central (celui d'un noyau atomique) dans un état propre de l'énergie de vp E_n et de L^2 de vp $\ell(\ell+1)\hbar^2$. Il existe $2\ell + 1$ états dégénérés $|E_n, \ell, m\rangle$ avec $m = -\ell, \dots, \ell$.

Si on plonge le système dans un champ magnétique uniforme, les états $|E_n, \ell, m\rangle$ sont $\vec{vp}$ de l'observable $\hat{H}_M$ avec vp

$$W_m = -m\mu_B B \ , \tag{4.17}$$

où $\mu_B = \frac{-e\hbar}{2m_e}$ est le magnéton de Bohr. La dégénérescence est donc levée par le champ magnétique. Cet effet peut être observé (dans un cas plus complexe) en plaçant une lampe au Cadmium dans un électro-aimant.

[Basdevant Ch. 10]

Le matériel nécessaire est dans la collection, Fabry-Pérot et électroaimant adaptés. [cf *Optique Expérimentale* de Sextant]

Mise en évidence de moments cinétiques demi-entiers : effet Zeeman anomal

D'après les résultats précédents, on voit que dans le cas qu'un moment cinétique orbital, le nombre de raies Zeeman est impair, pourtant on a observé un effet anormal (ou anomal) avec un nombre pair de raies (comme dans le cas du Sodium). Cet effet, longtemps inexpliqué (découvert en 1896, expliqué en 1925), est la preuve de l'existence de moments demi-entiers, donc non orbitaux et sans équivalents classiques !

Toutefois, cette interprétation repose sur le fait qu'on puisse étendre la forme de l'Eq. 4.15 a un moment cinétique quelconque

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma \hat{\mathbf{J}} \ . \tag{4.18}$$

Cette conjecture théorique, ainsi que celle de l'Eq. 4.16, est validée expérimentalement, notamment par le phénomène de précession de Larmor que nous traitons plus loin et qui permet de mesurer γ.

[Cohen tome II, Basdevant Ch. 12 p.255 ; Basdevant Ch. 10 p. 219]

4.1.7 Spin du photon

Approche classique : on décrit le comportement d'un électron atomique par un modèle d'électron élastiquement lié subissant une force de frottement fluide

$$m\ddot{\vec{r}} = -m\omega_0^2\vec{r} - m\dot{\vec{r}}/\tau - e\vec{E} \ ,$$

où le champ électrique est une perturbation externe, typiquement ici due à l'absorption d'un photon par l'édifice atomique, entrainant l'excitation de l'électron. On peut alors montrer que la réponse de l'électron à un champ $\vec{E}$ est

$$\vec{r} = \alpha\vec{E} = \frac{e/m}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\omega/\tau}\vec{E} \ .$$

En considérant une onde polarisée circulairement gauche, de pulsation ω et d'amplitude E_0, la puissance moyenne cédée par l'onde à l'atome est $< P >$ avec $P = -e\vec{E} \cdot \dot{\vec{r}}$ est

$$< P >= -e\omega E_0^2 Im(\alpha) \ ,$$

alors que le moment moyen $< \vec{M} >$ de la force exercée par l'onde sur l'atome, avec $\vec{M} = \vec{r} \times (-e\vec{E})$, est

$$< \vec{M} >= -eE_0^2 Im(\alpha)\vec{u}_z \ .$$

Approche quantique : un photon d'énergie $E = \hbar\omega$ et de moment cinétique $\vec{\sigma}$ est absorbée en un temps typique τ ce qui correspond à

$$< P >= \hbar\omega/\tau \ ,$$

et

$$< \vec{M} >= \vec{\sigma}/\tau \ .$$

D'où la relation

$$\vec{\sigma} = \hbar\omega < \vec{M} > / < P > \ ,$$

dont on déduit

$$\vec{\sigma} = \hbar\vec{u}_z \ ,$$

pour une onde polarisée circulaire gauche et

$$\vec{\sigma} = -\hbar\vec{u}_z \ ,$$

pour une onde polarisée circulaire droite.

Le photon est donc une particule de spin 1. On pourrait ajouter qu'une polarisation rectiligne correspond à la valeur 0 du spin dans cette approche. Toutefois, le bon point de vue ici serait de décomposer la polarisation rectiligne en deux polarisation circulaires droite et gauche, donc en deux photons de spins 1 et -1 : en effet, la valeur 0 du spin du photon est interdite. Cela est dû au fait que l'on ne peut se placer dans le référentiel du centre de masse du photon puisque celui-ci n'existe pas (masse nulle du photon). Si cela n'est pas démontrable dans le cadre de ce cours, on pourra retenir que spin du photon (1 ou -1) et polarisation de l'onde électromagnétique (circulaire droite ou gauche) sont des notions liées et qu'il n'existe que deux états de polarisation circulaire et pas de polarisation "0".

[Garing (7.2, p. 256) et Le Bellac p. 67]