

## MOMENTS CINÉTIQUES ET ROTATION

Les transformations par rotation, la conservation du moment cinétique et les techniques d'addition des moments cinétiques jouent un rôle très important en spectroscopie atomique et nucléaire, en physique des particules et dans de nombreux autres domaines de la physique et de la chimie. Des tables (épaisses) rassemblent les valeurs numériques et les propriétés des coefficients d'addition.

On se bornera ici à présenter les propriétés générales des rotations en mécanique quantique et les principes de l'addition des moments cinétiques.

On a vu précédemment que pour un système de points matériels décrits par une fonction d'onde  $\psi(\{\vec{r}_i\})$  l'opérateur qui représente la rotation d'angle  $\alpha$  autour du vecteur

unitaire  $\vec{n}$  est  $e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{L}}$  où  $\hat{L} = \sum_i \hat{L}_i$  est le moment orbital total, somme des moments

orbitaux  $\hat{L}_i = \vec{r}_i \wedge \vec{p}_i$  des différents points matériels.

Comme dans le cas des translations, nous allons ici suivre le chemin inverse. Postulant l'existence d'opérateurs unitaires qui décrivent les rotations d'un système dans l'espace de Hilbert de ses états, nous allons montrer qu'il est possible de définir le moment cinétique même dans le cas de système qui n'ont pas d'analogues classiques.

## 1. Quelques propriétés des rotations

Une rotation dans l'espace à trois dimensions est une transformation qui laisse invariant un point et conserve les longueurs, les angles et l'orientation des trièdres. Elle est représentée par une matrice 3x3, orthogonale ( $RR^+ = 1$ ) et de déterminant 1 qui agit sur les coordonnées d'un vecteur

$$\vec{V} \xrightarrow{R} \vec{V}' \quad \begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{xx} & R_{xy} & R_{xz} \\ R_{yx} & R_{yy} & R_{yz} \\ R_{zx} & R_{zy} & R_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$$

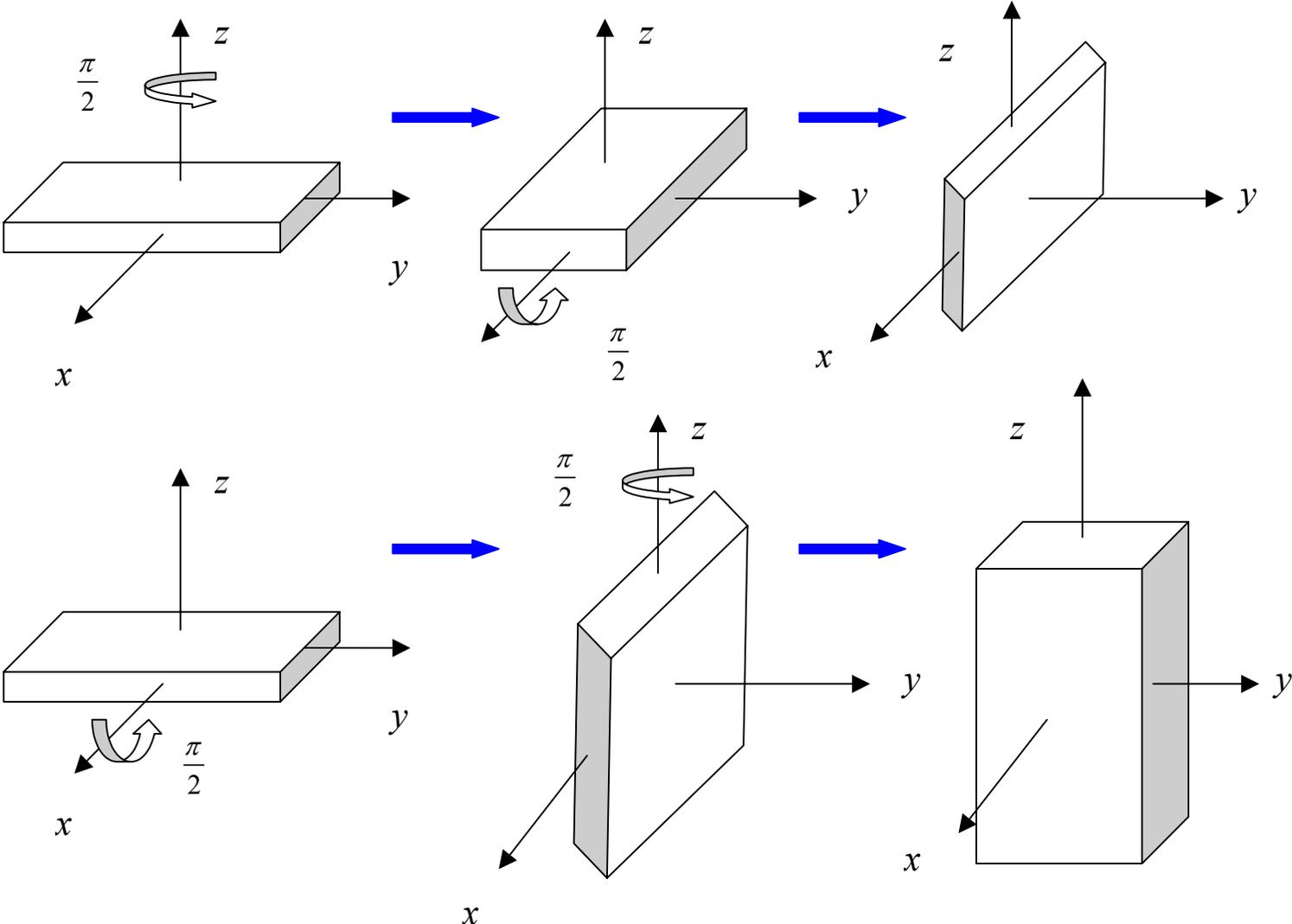
Les rotations forment un groupe ; contrairement aux translations ce groupe n'est pas commutatif (non Abélien). Il est clair sur la figure suivante que

$$R_x\left(\frac{\pi}{2}\right) R_z\left(\frac{\pi}{2}\right) \neq R_z\left(\frac{\pi}{2}\right) R_x\left(\frac{\pi}{2}\right)$$

La rotation  $R_z(\theta)$  de l'angle  $\theta$  autour de l'axe  $Oz$  s'écrit :

$$R_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Moments cinétiques



## Moments cinétiques

Les matrices de rotation autour de  $Ox$  et  $Oy$  se déduisent de la précédente par permutation circulaire des lignes et des colonnes.

Pour préciser les propriétés de commutation, nous allons utiliser des rotations infinitésimales. La rotation d'un angle infinitésimal  $\varepsilon$  autour du vecteur unitaire  $\vec{n}$  s'écrit, au premier ordre :

$$\vec{V}' = \vec{V} + \varepsilon \vec{n} \wedge \vec{V}$$

Au deuxième ordre on a :

$$R_z(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{pmatrix} \quad R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{pmatrix}$$

On a donc :  $R_x(\varepsilon) R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon) R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R_z(\varepsilon^2) - I$  et les deux relations qui s'en déduisent par permutation circulaire des indices.

## 2. Rotations en mécanique quantique

Comme pour les translations, postulons qu'il existe une famille d'opérateurs unitaires  $\hat{D}(\vec{n}, \varepsilon) = \hat{D}_R$  qui représentent (le terme peut être pris au sens mathématique de la théorie des représentations des groupes) les rotations de l'espace à 3 dimensions dans l'espace de Hilbert des états d'un système. C'est-à-dire que si  $|\psi\rangle$  est l'état d'un objet,  $|\psi\rangle_R = \hat{D}_R|\psi\rangle$  est l'état du même objet ayant subi la rotation  $R$  et que ces opérateurs possèdent les mêmes règles de multiplication que les rotations :  $\hat{D}_{R_2 R_1} = \hat{D}_{R_2} \hat{D}_{R_1}$ . La rotation infinitésimale autour du vecteur  $\vec{n}(n_x, n_y, n_z)$  est représentée par :

$$\hat{D}(\vec{n}, \varepsilon) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{G} = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} [n_x \hat{J}_x + n_y \hat{J}_y + n_z \hat{J}_z]$$

(La tradition veut que l'on note  $D$ , de l'allemand *Drehung*, les opérateurs de rotation)

$\hat{D}\hat{D}^\dagger = \hat{I} \quad \forall \vec{n} \Rightarrow \hat{J}_x = \hat{J}_x^+, \hat{J}_y = \hat{J}_y^+, \hat{J}_z = \hat{J}_z^+$ . A partir des opérateurs de rotations on définit ainsi 3 observables indépendantes qui sont les générateurs infinitésimaux des rotations autour des trois axes. En décomposant une rotation finie en produit de rotations infinitésimales on exprime l'opérateur de rotation à l'aide des générateurs

$$\hat{D}(\vec{n}, \alpha) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \frac{\alpha}{N} \vec{n} \cdot \hat{J} \right)^N = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{J}}$$

c'est-à-dire :  $\hat{D}_z(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \hat{J}_z}$  etc.

## Moments cinétiques

Voyons maintenant les conséquences de la propriété de commutation sur les observables  $\hat{J}_i$ . En développant au deuxième ordre en  $\varepsilon$ , l'opérateur de rotation autour de  $Ox$  s'écrit

$$\hat{D}_x(\varepsilon) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J}_x - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} \hat{J}_x^2$$

avec les expressions analogues pour  $\hat{D}_y$  et  $\hat{D}_z$ . On a postulé que les opérateurs de rotation dans l'espace de Hilbert ont les mêmes règles de multiplication que les rotations de l'espace à trois dimensions d'où :

$$\hat{D}_x(\varepsilon)\hat{D}_y(\varepsilon) - \hat{D}_y(\varepsilon)\hat{D}_x(\varepsilon) = [\hat{D}_x, \hat{D}_y] = \hat{D}_z(\varepsilon^2) - \hat{I}$$

ce qui s'écrit :

$$\left( \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_x - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} \hat{J}_x^2 \right) \left( \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_y - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} \hat{J}_y^2 \right) - \left( \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_y - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} \hat{J}_y^2 \right) \left( \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_x - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} \hat{J}_x^2 \right) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon^2 \hat{J}_z - \hat{I}$$

où les termes en  $\varepsilon$  disparaissent et les termes en  $\varepsilon^2$  donnent

$$\boxed{[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z}$$

On montre de même que

$$\boxed{[\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x} \quad \text{et} \quad \boxed{[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y}$$

Les opérateurs  $\hat{J}_i$  définis comme générateurs infinitésimaux des rotations vérifient les règles de commutation des moments cinétiques ( $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\hat{J}_k$ ). **Ce sont, par définition, les projections du moment cinétique du système, qu'il ait ou non un analogue classique.**

### 3. Rappels des propriétés des moments cinétiques

On rappelle ici les conséquences, étudiées en cours, des relations de commutation. L'opérateur carré du moment cinétique  $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$  commute avec  $\hat{J}_x, \hat{J}_y$  et  $\hat{J}_z$ . Les valeurs propres de  $\hat{J}_z$  sont  $m\hbar$ . Les nombres  $j$  et  $m$  sont **entiers ou demi entiers**. On utilise habituellement des E.C.O.C. qui contiennent les deux opérateurs  $\hat{J}^2$  et  $\hat{J}_z$ ; ceci permet de définir des bases de vecteurs propres de ces E.C.O.C. dont les vecteurs sont notés  $|\alpha, j, m\rangle$ ,  $\alpha$  symbolisant les valeurs propres de toutes les observables autres que  $\hat{J}^2$  et  $\hat{J}_z$  qui font partie de l' E.C.O.C.

$$\hat{J}^2|\alpha, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|\alpha, j, m\rangle \quad \hat{J}_z|\alpha, j, m\rangle = m\hbar|\alpha, j, m\rangle$$

Le sous-espace qui correspond à des valeurs données de  $j$  et  $m$  est de dimension  $2j+1$ ,  $m$  prenant toutes les valeurs comprises entre  $-j$  et  $+j$ . On peut construire les vecteurs de base de ce sous-espace à partir de l'un d'entre eux à l'aide des opérateurs  $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$

$$\hat{J}_\pm|\alpha, j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|\alpha, j, m \pm 1\rangle$$

Une telle base est appelée **base standard**.

#### 4. Transformation des observables, conservation du moment cinétique

Une rotation des appareils de mesure est représentée par une transformation de l'observable associée  $\hat{O}$ . Soit  $R$  (rotation de  $\alpha$  autour de  $\vec{n}$ ) la rotation de l'appareil. La transformation de  $\hat{O}$  s'écrit :

$$\hat{O} \xrightarrow{R} \hat{O}_R = \hat{D}_R \hat{O} \hat{D}_R^\dagger = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{J}} \hat{O} e^{\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{J}}$$

Une observable est invariante par rotation (on dit aussi scalaire) si :

$$\hat{O}_R = \hat{O} \quad \forall R$$

Ceci implique qu'elle commute avec les trois composantes du moment cinétique :

$$[\hat{O}, \hat{J}_i] = 0 \quad i = x, y, z$$

Si le Hamiltonien est invariant par rotation, les  $\hat{J}_i$  commutent avec lui et par conséquent avec l'opérateur d'évolution.

**L'invariance du Hamiltonien par rotation implique la conservation du moment cinétique total  $\hat{J}$ .**

##### 4.1. Observables scalaires, observables vectorielles

Les termes **scalaires** et **vecteur** n'ont pas la même signification en Mathématiques et en Physique. Pour un physicien, une grandeur scalaire est une grandeur invariante par

## Moments cinétiques

rotation, l'énergie par exemple. Une grandeur vectorielle  $\vec{V}$  est un triplet de grandeurs  $(V_x, V_y, V_z)$  qui se transforment dans une rotation suivant la règle donnée en 1. ; par exemple l'impulsion, le champ électrique ... (On classifie, sous le nom de **tenseurs**, les grandeurs physiques par leurs propriétés de transformation sous les rotations. Les vecteurs sont les plus simples, après les scalaires).

En mécanique quantique, il est possible de caractériser les grandeurs vectorielles par les règles de commutation, avec le moment cinétique total, des observables qui leur sont associées.

Considérons un système décrit par un ket  $|\psi\rangle$  sur lequel on effectue la mesure d'une composante d'une observable vectorielle :  $\hat{V}_i$ . La valeur moyenne de cette mesure est

$$\langle \hat{V}_i \rangle = \langle \psi | \hat{V}_i | \psi \rangle$$

Sur le même système ayant subi une rotation  $R$  la valeur moyenne est :

$$\langle \hat{V}_i \rangle' = \langle \psi | \hat{D}_R^\dagger \hat{V}_i \hat{D}_R | \psi \rangle$$

D'après la définition d'une grandeur vectorielle on doit avoir également la relation vue en 1.

$$\langle \hat{V}_i \rangle' = \sum_j R_{ij} \langle \hat{V}_j \rangle$$

Prenons l'exemple d'une rotation infinitésimale de  $\varepsilon$  autour de  $Oz$  :  $\hat{D}_z(\varepsilon) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J}_z$ . Au premier ordre en  $\varepsilon$

$$\hat{D}_z^\dagger(\varepsilon) \hat{V}_i \hat{D}_z(\varepsilon) = \hat{V}_i + \frac{i}{\hbar} \varepsilon [\hat{J}_z, \hat{V}_i]$$

## Moments cinétiques

D'autre part, toujours au premier ordre en  $\varepsilon$

$$R_z(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

l'identification de  $\langle \hat{V}_i \rangle' = \langle \psi | \hat{D}_R^\dagger \hat{V}_i \hat{D}_{Ri} | \psi \rangle$  et  $\langle \hat{V}_i \rangle' = \sum_j R_{ij} \langle \hat{V}_j \rangle$ , valable pour tout  $|\psi\rangle$ , donne les

relations entre opérateurs :

$$\begin{cases} i = x & \hat{V}_x + \frac{i}{\hbar} \varepsilon [\hat{J}_z, \hat{V}_x] = \hat{V}_x - \varepsilon \hat{V}_y \\ i = y & \hat{V}_y + \frac{i}{\hbar} \varepsilon [\hat{J}_z, \hat{V}_y] = \varepsilon \hat{V}_x + \hat{V}_y \\ i = z & \hat{V}_z + \frac{i}{\hbar} \varepsilon [\hat{J}_z, \hat{V}_z] = \hat{V}_z \end{cases}$$

On voit donc que les observables vectorielles sont caractérisées par les relations de commutation :

$$\boxed{[\hat{J}_z, \hat{V}_x] = i\hbar V_y \quad [\hat{J}_z, \hat{V}_y] = -i\hbar V_x \quad [\hat{J}_z, \hat{V}_z] = 0}$$

et les relations analogues pour  $\hat{J}_x$  et  $\hat{J}_y$  qui se déduisent des précédentes par permutation circulaire des indices. On peut vérifier que ces règles de commutation entraînent la bonne

loi de transformation de  $\langle \hat{V} \rangle$  dans des rotations finies et que  $\hat{r}, \hat{p}, \hat{L}, \hat{J} \dots$  sont des observables vectorielles.

On peut aussi obtenir à partir des relations de commutation précédentes, un résultat intuitif : le produit scalaire  $\hat{V} \cdot \hat{U} = \hat{V}_x \hat{U}_x + \hat{V}_y \hat{U}_y + \hat{V}_z \hat{U}_z$  de deux observables vectorielles est une observable scalaire. Ceci permet d'identifier simplement certains Hamiltoniens invariants par rotation comme par exemple  $\hat{L} \cdot \hat{S}$  ou  $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ .

## 4.2. Opérateurs tensoriels, théorème de Wigner-Eckart

On peut caractériser, de façon analogue, par leurs lois de transformation sous les rotations des ensembles d'observables appelées **observables tensorielles**. Un des intérêts de cette classification est que les éléments de matrice de ces opérateurs dans une base standard peuvent se calculer en fonction d'un petit nombre de paramètres grâce au **théorème de Wigner-Eckart**. Dans le cas particulier des opérateurs vectoriels, on peut énoncer ce théorème de la façon suivante : **Dans un sous-espace propre de dimension  $(2j+1)$  ( $j$  et  $\alpha$  fixés) d'une base standard  $\{|\alpha, j, m\rangle\}$ , les matrices qui représentent les composantes d'un opérateur vectoriel sont proportionnelles aux matrices qui représentent les composantes de  $\hat{J}$**

$$\tilde{V}_i = v(\alpha, j) \tilde{J}_i$$

**Le coefficient  $v$  étant le même pour les trois composantes.**

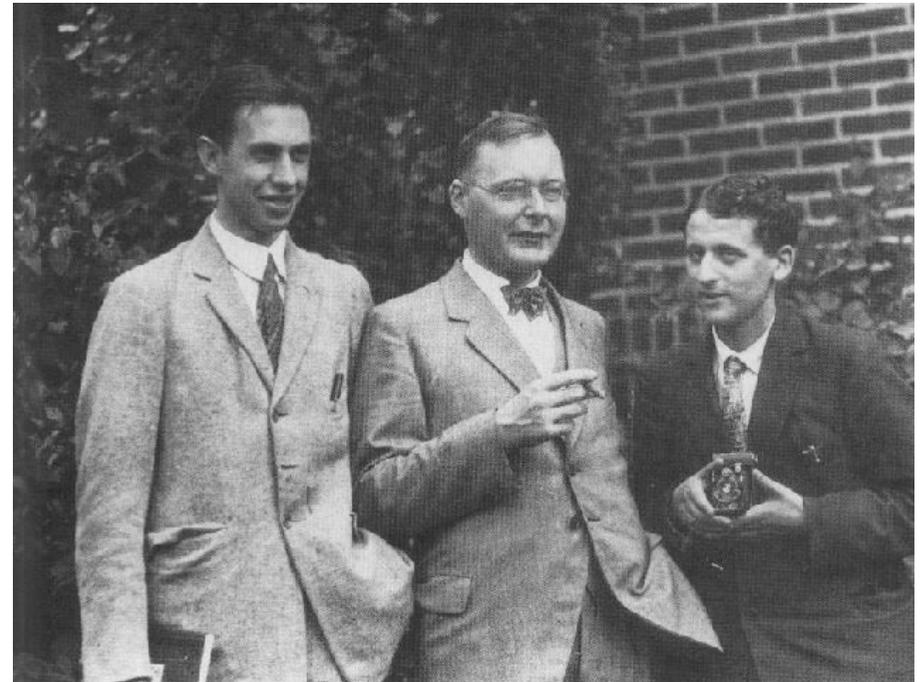
Nous utilisons la notation  $\tilde{V}$  (et non  $\hat{V}$ ) pour insister sur le fait qu'il s'agit d'une relation entre matrices  $(2j+1) \times (2j+1)$  et non entre opérateurs.

C'est l'origine de la relation  $\vec{\mu} = \gamma \vec{J}$  entre moment magnétique et moment cinétique.



Trois physiciens discutent de la manière optimale de mettre en évidence des effets de spin dans les collisions de protons à l'accélérateur d'Argonne (USA)

## 5. LE SPIN



Uhlenbeck (à gauche) et Goudsmit (à droite)

## L'EXPERIENCE DE STERN (1921) ET GERLACH (1921- 1922)

**O.Stern : Zeitschrift für Physik 7,249,(1921). W.Gerlach and O.Stern : Zeitschrift für Physik 9,34,(1922)**

Un jet atomique d'atomes d'argent est émis d'un four (température  $\approx 1000\text{K}$ ) collimaté par une ouverture de  $\varnothing \approx 0,1\text{mm}$ . Ce jet passe ensuite dans l'entrefer d'un électro-aimant présentant un fort gradient de champ et les atomes se dirigent vers un écran où ils sont détectés (fig.1).

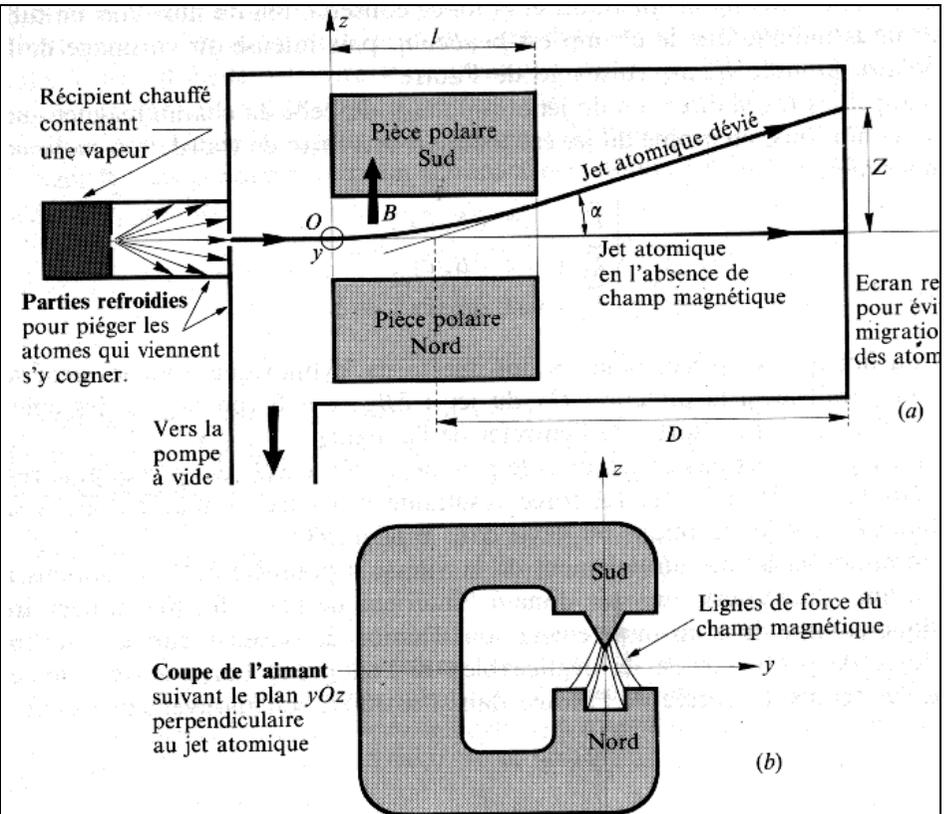
Le fait que la trajectoire des atomes soit déviée par le champ magnétique laisse supposer qu'ils sont porteurs d'un moment magnétique permanent  $\vec{M}$ .

Soit un atome de moment magnétique  $\vec{M}$  soumis à un champ magnétique  $\vec{B}$  **inhomogène**.

Il est par conséquent soumis à un couple  $\vec{\Gamma} = \vec{M} \wedge \vec{B}$  (1) qui le fait précesser **rapidement** autour du champ et à une force  $\vec{F} = (\vec{M} \cdot \nabla) \cdot \vec{B}$  (2) qui tend à le déplacer.

La composante de cette force suivant un axe  $z$  s'écrit :

$$F_z = (\vec{M} \cdot \nabla) B_z = M_x \frac{\partial B_z}{\partial x} + M_y \frac{\partial B_z}{\partial y} + M_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (3)$$



**Figure 1**

## Moments cinétiques

Supposons que  $\vec{B} \approx B(z)\vec{u}_z$  (4).  $M_z$  est alors constante et  $M_x$  et  $M_y$  subissent une variation sinusoïdale **très rapide** et leur valeur moyenne au cours du temps ( $\langle M_x \rangle$  et  $\langle M_y \rangle$ ) est nulle. Dans ces conditions l'équation (3) montre que :

$$\langle F_z \rangle = M_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (5)$$

*L'observation du déplacement d'un atome sous l'action d'un champ magnétique inhomogène peut donc fournir une mesure de la composante longitudinale  $M_z$  (parallèle au champ magnétique) de son moment magnétique.*

La condition (4) est respectée **au mieux** (l'équation de Maxwell  $\nabla \cdot \vec{B} = 0$  devant être satisfaite!) de la façon suivante : les pièces polaires de l'aimant ont une forme cylindrique dont les génératrices sont parallèles à la direction  $Ox$  du jet et de ce fait :  $\frac{\partial B_z}{\partial x} \approx 0$ , d'autre part, le gradient du champ suivant  $z$  est très important et enfin, si le jet est bien dans le plan de symétrie  $xOz$ ,  $\frac{\partial B_z}{\partial y} \approx 0$ . La force résultante moyenne s'exerçant sur les atomes du jet se réduit alors à (5) et dans ces conditions **le jet atomique est dévié dans le plan  $xOz$ .**

Un atome du jet, animé initialement de la vitesse  $v$  parallèle à  $Ox$  et soumis à l'action de la force constante (5) (on peut montrer que la force de pesanteur est ici négligeable) suit à l'intérieur de l'entrefer une trajectoire parabolique.

Si l'on prend l'origine des axes et l'origine des temps à l'entrée de l'atome dans l'entrefer, son mouvement s'écrit :

$$\begin{cases} x = vt \\ z = \frac{1}{2} \frac{\langle F_z \rangle}{m} t^2 \end{cases}$$

L'atome sort de l'entrefer à l'instant  $t = \frac{l}{v}$  ; il continue alors son mouvement en ligne droite, mais il a été dévié de l'angle  $\alpha$  tel que :  $\tan \alpha = \frac{dz}{dx} = \frac{\langle F_z \rangle t}{mv} = \frac{\langle F_z \rangle l}{mv^2}$ . La tangente à la parabole au point d'abscisse  $l$  coupe la tangente à l'origine au point d'abscisse  $\frac{l}{2}$ . Si on appelle  $D$  la distance entre le milieu de l'entrefer et l'écran sur lequel on recueille les atomes, leur point d'impact se trouve déplacé de la distance :

$$Z = \langle F_z \rangle \frac{lD}{mv^2}$$

Si  $T$  est la température de la vapeur et  $k_B$  la constante de Boltzmann, la vitesse  $v$  est la vitesse quadratique moyenne :  $v = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$ . On en déduit le déplacement le plus probable au point d'impact des atomes (maximum de densité de la tache à

$$\langle F_z \rangle \text{ donnée) : } Z = \langle F_z \rangle \frac{lD}{3k_B T} = M_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \frac{lD}{3k_B T} \quad (6)$$

Toutes les quantités qui figurent dans cette expression sont

Ce qui conduit à la conclusion qu'il n'existe que deux valeurs possibles pour  $M_z$ .  
 $M_z$  est quantifiée.

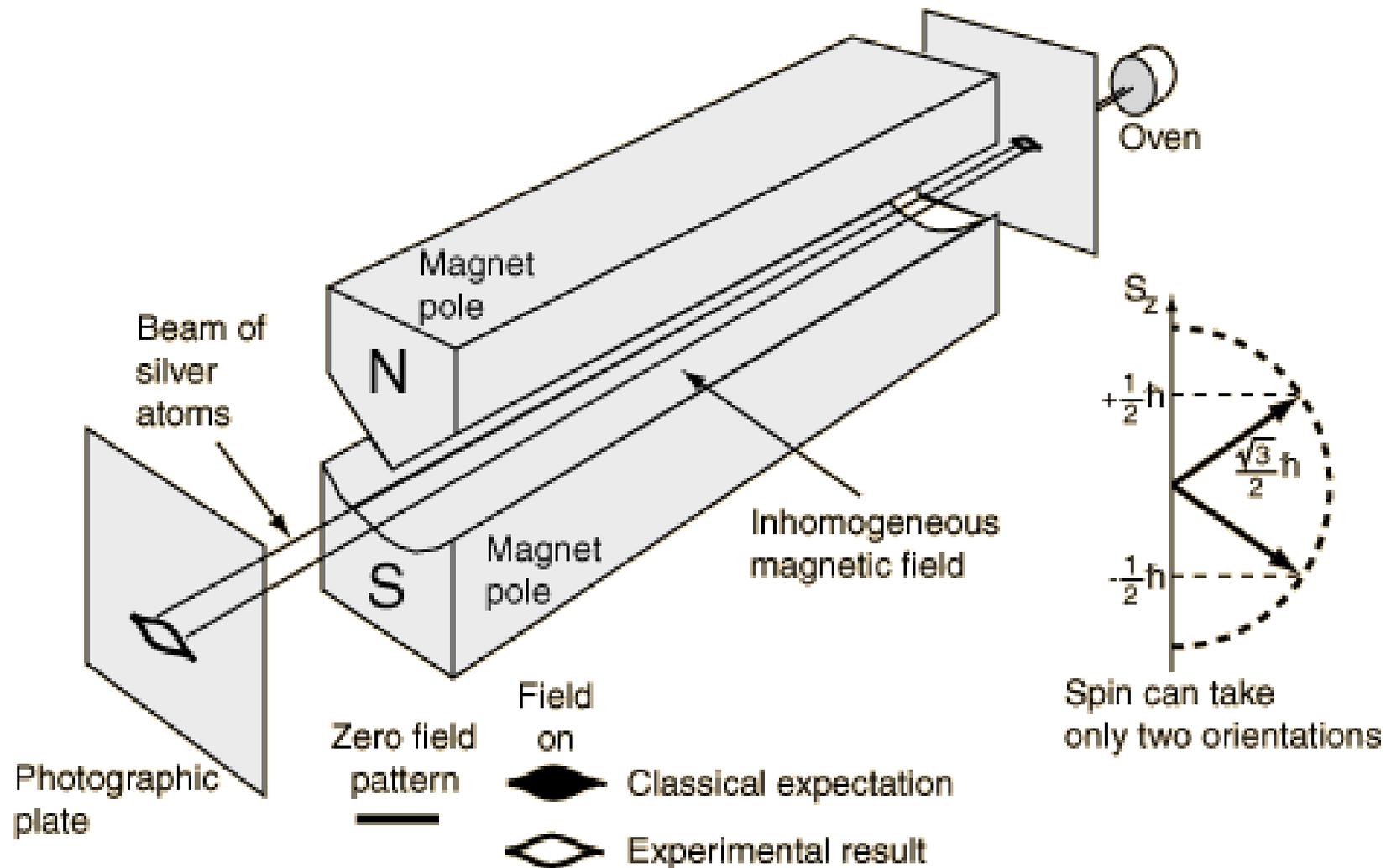
En 1921 et en 1922 les conclusions de l'expérience se limitaient là, puisqu'il faudra attendre 1925 que Uhlenbeck et Goudsmit introduisent le spin pour pouvoir exploiter la proportionnalité du moment magnétique  $\vec{M}$  et du spin  $\vec{S}$  :

$$\vec{M} = \gamma \vec{S}$$

où  $\gamma$  est le rapport gyromagnétique et comprendre le fait que deux taches seulement sont observées dans cette expérience (très difficile à réaliser à l'époque).

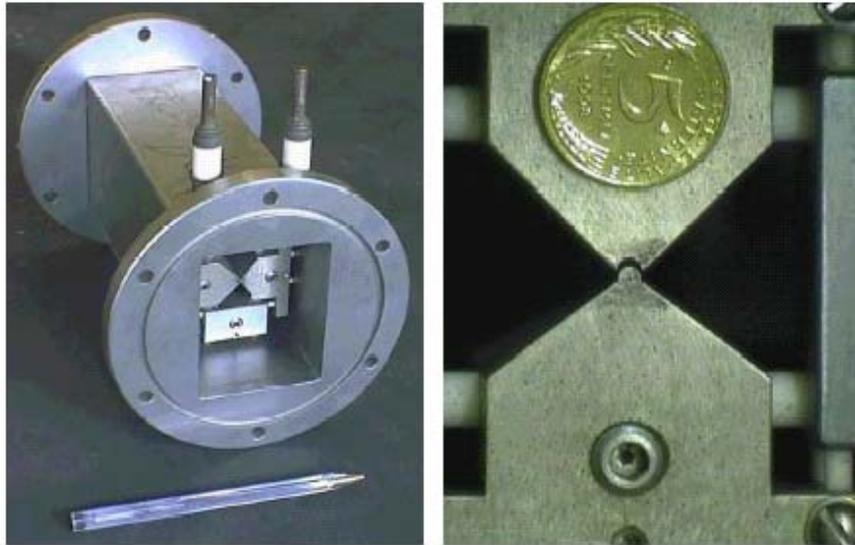
(Si le moment cinétique orbital avait été la grandeur pertinente, les expérimentateurs auraient dû observer un nombre impair de taches).

### L'EXPERIENCE DE STERN (1921) ET GERLACH (1921- 1922)



*Moments cinétiques*

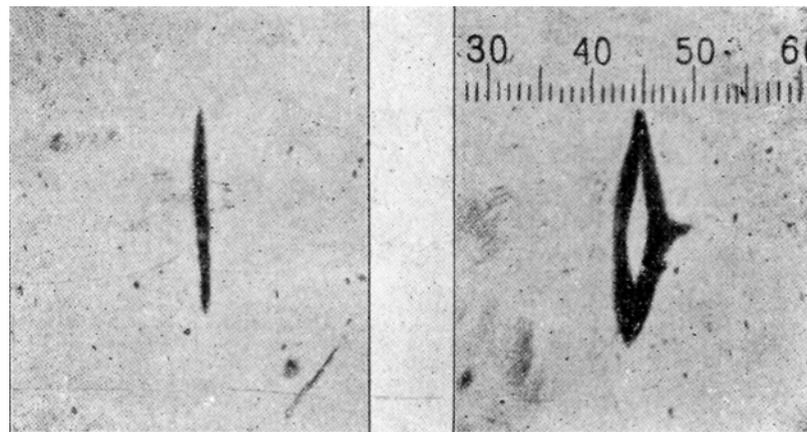
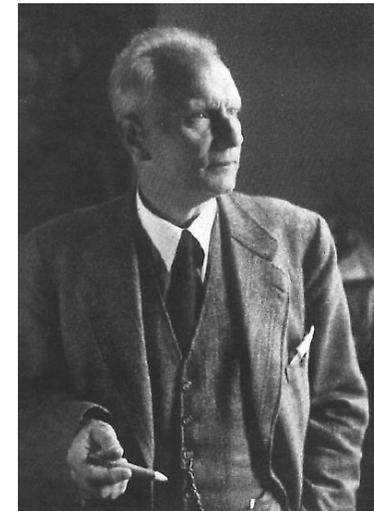
**Détail des pièces polaires produisant le gradient de champ magnétique**



**Otto Stern (1921)**



**Gerlach (1922)**



**Signal expérimental obtenu par Otto Stern**

**A gauche**, en l'absence de gradient de champ

**A droite**, en présence d'un gradient de champ



Direction de l'axe Oz

Dans le cas d'un point matériel décrit par une fonction d'onde  $\psi(\vec{r})$  qui est l'équivalent d'un système classique, l'opérateur de rotation est  $e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \vec{n} \cdot \hat{L}}$  où  $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$  est le moment cinétique orbital. On voit donc que, comme en mécanique classique, un point matériel au repos est invariant par rotation. La définition plus générale du moment cinétique que nous venons de donner permet d'imaginer que l'état d'une particule au repos puisse ne pas être invariant par rotation, que la particule au repos puisse posséder **un moment cinétique intrinsèque** (ceci revient à dire que les propriétés de transformation par rotation ne sont pas déterminées par les propriétés de transformation par translation). Cette possibilité de la mécanique quantique est largement utilisée par la Nature et la plupart des particules élémentaires connues possèdent un moment cinétique intrinsèque, leur **spin**. L'état d'une telle particule ne peut pas être décrit dans un espace de fonctions d'onde de la position ; il faut utiliser le produit tensoriel de l'espace des fonctions d'onde  $\psi(\vec{r})$  par un espace de spin. La dimension  $(2s+1)$  (avec  $s$  entier ou demi entier) de cet espace définit le spin de la particule.

Un opérateur de rotation s'écrit alors  $e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \vec{n} \cdot \hat{J}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \vec{n} \cdot \hat{L}} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \vec{n} \cdot \hat{S}}$ . Les opérateurs  $\hat{L}_i$  sont les opérateurs du moment cinétique orbital, agissant dans l'espace des fonctions d'onde, qui « font tourner » les caractéristiques spatiales de la particule. Les opérateurs  $\hat{S}_i$  agissent dans l'espace à  $(2s+1)$  dimensions qui décrit le moment cinétique intrinsèque ; ils « font tourner » ce moment cinétique et, éventuellement le **moment magnétique intrinsèque** qui lui est associé. Le moment cinétique total de la particule est  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ .

## L'EXEMPLE DU SPIN $\frac{1}{2}$

L'espace de spin le plus simple est de dimension 2 ; il décrit les états d'une particule de spin  $\frac{1}{2}$ . En prenant pour base les états propres de  $\hat{S}_z$  :  $\left\{ |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$ . L'action des opérateurs  $\hat{S}_+$  et  $\hat{S}_-$  sur ces vecteurs de base montre que :

$$\hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Les opérateurs de moment cinétique sont donc  $\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$  où les  $\sigma_i$  sont les matrices de Pauli

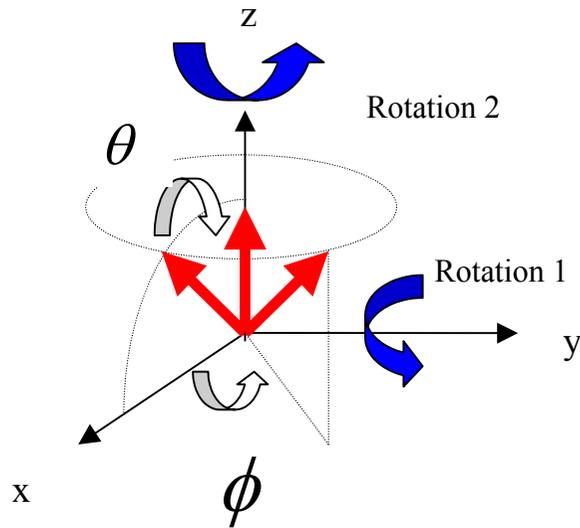
$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Les opérateurs de rotation sont eux aussi des matrices 2x2.  $\hat{S}_z$  étant diagonal la matrice de rotation autour de  $Oz$  est diagonale :

$$\hat{D}_z(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \hat{S}_z} = e^{-i \frac{\phi}{2} \sigma_z} = \begin{pmatrix} e^{-i \frac{\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i \frac{\phi}{2}} \end{pmatrix}$$

L'opérateur de rotation autour de  $Oy$  s'obtient en développant l'exponentielle en série et en remarquant que  $\sigma_y^2 = I \Rightarrow \sigma_y^{2p} = I$  et  $\sigma_y^{2p+1} = \sigma_y$

$$\hat{D}_y(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_y} = \sum_n \frac{1}{n!} \left(-i\frac{\theta}{2}\right)^n \sigma_y^n = \cos\frac{\theta}{2} I - i \sin\frac{\theta}{2} \sigma_y = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$



A titre d'exemple nous pouvons utiliser ces matrices pour construire les états propres de  $\hat{S} \cdot \vec{n}$  ( $\vec{n}$  vecteur unitaire de coordonnées polaires  $\theta$  et  $\phi$ ) en remarquant (cf. figure ci-contre) qu'ils se déduisent des états propres de  $\hat{S}_z$  par une rotation de l'angle  $\theta$  autour de  $Oy$  suivie d'une rotation d'angle  $\phi$  autour de  $Oz$ . La matrice de rotation s'écrit :

$$D_z(\phi)D_y(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}} \cos\frac{\theta}{2} & -e^{-i\frac{\phi}{2}} \sin\frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\phi}{2}} \sin\frac{\theta}{2} & e^{i\frac{\phi}{2}} \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

Les deux états propres transformés de  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  sont donc

$$\begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\phi}{2}} \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \text{ et } \begin{pmatrix} -e^{-i\frac{\phi}{2}} \sin\frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\phi}{2}} \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

On peut vérifier qu'ils sont bien vecteurs propres de

$$\hat{\sigma} \cdot \vec{n} = \cos \theta \sigma_z + \sin \theta \sin \phi \sigma_y + \sin \theta \cos \phi \sigma_x = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

## 6. Addition des moments cinétiques

La notion d'addition des moments cinétiques est une notion habituelle en mécanique classique. Le moment cinétique total du système solaire, par exemple, est la somme des moments cinétiques orbitaux du mouvement des planètes autour du Soleil est des moments cinétiques propres dus à la rotation des planètes (et du soleil lui-même) autour de leurs centres.

La même notion s'applique à un système atomique, nucléaire ou de particules élémentaires. Le moment cinétique total est la somme des moments cinétiques orbitaux et des spins (moments cinétiques intrinsèques) des composants.

En mécanique quantique les moments cinétiques sont des triplets d'opérateurs  $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$  qui agissent sur l'espace de Hilbert des états du système. Leur définition comme générateurs infinitésimaux des rotations peut aider à comprendre la façon dont ils opèrent.

Soit  $\Sigma = \bigotimes_i \mathcal{E}_{r_i} \bigotimes_i \mathcal{E}_{s_i}$  l'espace des états d'un ensemble de particules, où  $\mathcal{E}_{r_i}$  est l'espace des fonctions d'ondes  $\psi(\vec{r}_i)$  de la particule  $i$  et  $\mathcal{E}_{s_i}$  l'espace de ses états de spin. Les opérateurs

de moment orbital  $\hat{L}_i$  et l'opérateur de rotation  $e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{L}_i}$  agissent dans l'espace  $\mathcal{E}_{r_i}$ . L'opérateur de rotation « fait tourner » les caractéristiques spatiales de la particule  $i$ . Les

## Moments cinétiques

opérateurs de spin  $\hat{S}_i$  et l'opérateur de rotation  $e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \vec{n} \cdot \hat{S}_i}$  agissent dans  $\mathcal{E}_{s_i}$ . L'opérateur de rotation « fait tourner » le spin de la particule  $i$ . L'opérateur  $\hat{L}_{z_i}$  qui agit dans  $\mathcal{E}_{r_i}$  peut être considéré comme un opérateur agissant dans  $\Sigma$  sous la forme :  $\hat{L}_{z_i} \otimes \hat{I} \dots \otimes \hat{I}$ .

L'opérateur qui représente une rotation de l'ensemble du système est :

$$\bigotimes_i e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \vec{n} \cdot \hat{L}_i} \bigotimes_i e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \vec{n} \cdot \hat{S}_i} = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \vec{n} \cdot \hat{J}} \quad \text{avec} \quad \hat{J} = \sum_i \left( \hat{L}_i + \hat{S}_i \right)$$

On sait que les valeurs propres de  $\hat{J}^2$  sont quantifiées et prennent les valeurs  $j(j+1)\hbar^2$ . Le problème de l'addition des moments cinétiques en mécanique quantique consiste à déterminer, connaissant les valeurs propres de  $\hat{J}_1^2$  et  $\hat{J}_2^2$ , les valeurs propres possibles de  $\hat{J}^2$ ,  $\left( \hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2 \right)$  et à construire une base d'états propres de  $\hat{J}^2$  et  $\hat{J}_z$  à partir du produit tensoriel des bases d'états propres de  $\hat{J}_1^2$  et  $\hat{J}_{z_1}$  et de  $\hat{J}_2^2$  et  $\hat{J}_{z_2}$ .

Considérons deux systèmes indépendants de moment cinétique  $\hat{J}_1$  et  $\hat{J}_2$ . Pour alléger les notations nous supposons que  $\hat{J}_1^2$  et  $\hat{J}_{z_1}$  forment un E.C.O.C. pour le premier système et que  $\hat{J}_2^2$  et  $\hat{J}_{z_2}$  forment un E.C.O.C. pour le second. Les vecteurs  $|j_1, m_1\rangle$  forment donc une base pour l'espace  $\mathcal{E}_1$  des états du premier système ; les vecteurs  $|j_2, m_2\rangle$  une base de  $\mathcal{E}_2$ . L'espace de Hilbert des états du système total est  $\Sigma = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  dont les vecteurs

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

## Moments cinétiques

forment une base.  $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$  est le moment cinétique total.

Les opérateurs  $\hat{J}_1^2$  et  $\hat{J}_2^2$  commutent puisqu'ils agissent dans des espaces différents ; ils commutent avec  $\hat{J}^2$  et  $\hat{J}_z$  puisqu'ils sont scalaires. Les quatre opérateurs  $\hat{J}^2$ ,  $\hat{J}_z$ ,  $\hat{J}_1^2$  et  $\hat{J}_2^2$  commutent donc entre eux. Nous allons montrer qu'ils forment un E.C.O.C. en construisant leur base propre :  $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ . Plaçons nous dans le sous espace propre de dimension  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$  qui correspond aux valeurs propres  $j_1$  et  $j_2$ .

● Soit  $m\hbar$  la valeur propre de  $\hat{J}_z$ . Tout élément de la base factorisée  $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$  est vecteur propre de  $\hat{J}_z$  avec la valeur propre  $m = m_1 + m_2$ .

● On voit sur la figure ci-dessous que le valeur maximum de  $m$  est  $j_1 + j_2$  qui correspond au vecteur  $|j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle$ .

● Ce vecteur est vecteur propre de  $\hat{J}^2$  avec la valeur propre  $j = j_1 + j_2$ . En effet

$$\hat{J}_+ |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle = (\hat{J}_{1+} |j_1, j_1\rangle) \otimes |j_2, j_2\rangle + |j_1, j_1\rangle \otimes (\hat{J}_{2+} |j_2, j_2\rangle) = 0$$

ce qui implique (d'après la relation  $\hat{J}_\pm |j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} |j, m\pm 1\rangle$ ) que c'est un vecteur propre de  $\hat{J}^2$  avec  $j = m = j_1 + j_2$

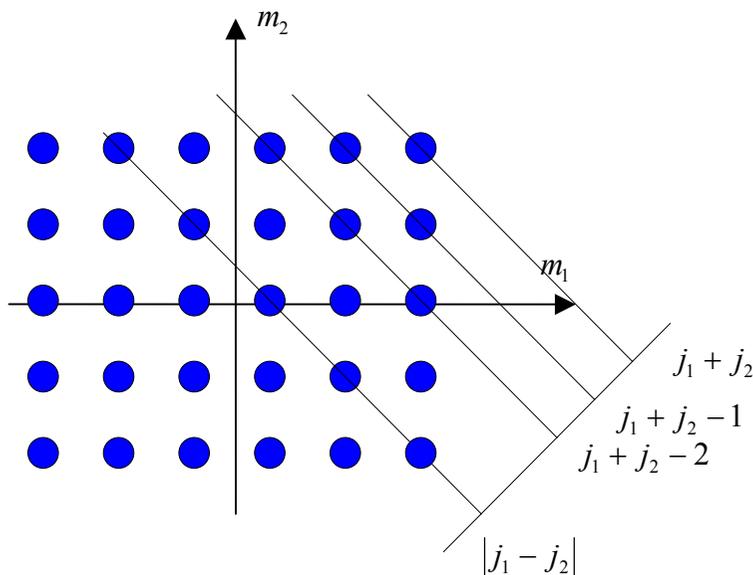
$$|j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle = |j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle$$

● En appliquant l'opérateur  $\hat{J}_-$  on obtient les  $(2j + 1)$  vecteurs de base

$$|j_1, j_2; j, m\rangle \text{ pour } j = j_1 + j_2$$

## Moments cinétiques

● Le sous espace propre de  $\hat{J}_z$  associé à la valeur propre  $m = j_1 + j_2 - 1$  est de dimension 2 (voir figure) . Soit  $|\chi\rangle$  le vecteur de ce sous espace orthogonal à  $|j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$  et normalisé à 1. Le vecteur  $\hat{J}_+|\chi\rangle$  appartient à  $\varepsilon_1 \otimes \varepsilon_2$  ; ce ne peut pas être le vecteur  $|j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle$  puisque  $\langle j_1, j_1 | \otimes \langle j_2, j_2 | \hat{J}_+|\chi\rangle = \langle j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 | \chi\rangle = 0$ . On a donc  $\hat{J}_+|\chi\rangle = 0$ . C'est-à-dire (toujours d'après la relation  $\hat{J}_\pm|j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}|j, m\pm 1\rangle$ )  $|\chi\rangle = |j_1, j_2; j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$ .



● En appliquant l'opérateur  $\hat{J}_-$  on obtient les  $2j + 1$  vecteurs de base  $|j_1, j_2; j, m\rangle$  pour  $j = j_1 + j_2 - 1$ .

On peut ainsi, de proche en proche, construire la base  $|j_1, j_2; j, m\rangle$ .

Comme la dimension du sous espace propre de  $\hat{J}_z$  associé à  $m$  (nombre de cercles sur la figure) augmente de 1 quand  $m$  diminue de 1 et que  $|j_1 - j_2| \leq m \leq j_1 + j_2$ , le processus peut continuer jusqu'à  $j = |j_1 - j_2|$ . En remarquant que

$$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j + 1)$$

on voit que la base obtenue est alors complète. On obtient ainsi le théorème fondamental :

## Théorème fondamental

Dans l'espace à  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$  dimensions sous-tendu par les vecteurs  $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$  ( $j_1, j_2$  fixes :  $m_1, m_2$  variables), il existe une base de vecteurs propres  $\{|j_1, j_2, j, m\rangle\}$  du moment cinétique total.

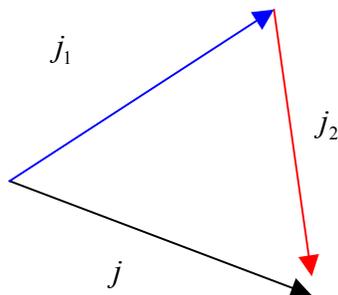
Les valeurs possibles de  $j$  sont telles que  $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$

A chacune d'elle correspond une et une seule série de  $(2j + 1)$  vecteurs propres

$|j_1, j_2, j, m\rangle$  ( $-j \leq m \leq j$ )

En terme mathématique, on peut écrire ce résultat sous la forme compacte

$$\mathcal{E}_{2j_1+1} \otimes \mathcal{E}_{2j_2+1} = \bigoplus_{j=|j_1-j_2|}^{j=j_1+j_2} \mathcal{E}_{2j+1}$$



En terme plus physique on peut remarquer que la première partie du théorème n'est rien d'autre que l'inégalité triangulaire qui assure qu'un vecteur de longueur  $j$  peut être la somme d'un vecteur de longueur  $j_1$  et d'un vecteur de longueur  $j_2$

## Moments cinétiques

Les éléments de la matrice de passage de la base  $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$  à la base  $\{|j_1, j_2; j, m\rangle\}$  sont appelés **coefficients de Clebsch-Gordan**.

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

On choisit les conventions de phase dans la définition des bases standard de façon à ce que ces coefficients soient réels. Nous donnons ci-dessous leurs valeurs dans le cas où l'un des deux moments cinétiques vaut  $\frac{1}{2}$ . Rappelons, pour aider la lecture de la table, que l'on a toujours  $m = m_1 + m_2$ .

$\langle j_1, j_2; m_1, m_2   j_1, j_2, j, m\rangle$ $j_2 = \frac{1}{2}$	$m_2 = \frac{1}{2}$	$m_2 = -\frac{1}{2}$
$j = j_1 + \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$	$\sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$
$j = j_1 - \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$	$\sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$

## Exemple : Addition de deux spin $\frac{1}{2}$

Notons  $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$  le spin total,  $s$  sa valeur propre. Les valeurs possibles sont  $s = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases}$ .

En utilisant la table de coefficients on construit les états propres  $|s, m\rangle$

$$\begin{cases} |1,1\rangle = |+\rangle \otimes |+\rangle \\ |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+\rangle \otimes |-\rangle + |-\rangle \otimes |+\rangle] \\ |1,-1\rangle = |-\rangle \otimes |-\rangle \\ |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle] \end{cases}$$

où l'on a noté  $|\pm\rangle$  les deux états d'un spin  $\frac{1}{2}$ . L'état **triplet**  $s = 1$  est symétrique dans l'échange des deux spins, l'état **singulet**  $s = 0$  est antisymétrique.

## 7. Application : Clivage par une perturbation d'un niveau dégénéré

Lorsqu'on ajoute au Hamiltonien  $\hat{H}_0$  d'un système un Hamiltonien de perturbation  $\hat{h}$  qui représente une correction à l'énergie, un niveau d'énergie dégénéré de  $\hat{H}_0$  peut être décomposé en sous niveaux non dégénérés par l'effet de la perturbation.

Au premier ordre en  $\hat{h}$ , les corrections aux énergies propres sont les valeurs propres de la matrice qui représente  $\hat{h}$  dans le sous espace propre de  $\hat{H}_0$ . Les états propres sont les vecteurs propres de cette matrice.

Lorsque  $\hat{H}_0$  et  $\hat{h}$  sont invariants par rotation, on peut écrire, pratiquement sans calcul, le résultat de la méthode des perturbations en remarquant que les états propres de  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{h}$  peuvent être cherchés parmi les états propres de  $\hat{J}^2$  et  $\hat{J}_z$ .

### ● Interaction $\hat{L} \cdot \hat{S}$

Cette interaction entre le moment cinétique orbital et le spin est responsable de la **structure fine** des atomes monovalents ; elle joue aussi un rôle important en physique nucléaire et subnucléaire.

$$\hat{h} = \alpha \hat{L} \cdot \hat{S}$$

$\hat{L} \cdot \hat{S}$  est un opérateur scalaire. Les états  $|\alpha, l, s; j, m\rangle$  sont donc états propres de  $\hat{h}$ . Les valeurs propres s'obtiennent en utilisant l'identité :

$$\hat{J}^2 = \left( \hat{L} + \hat{S} \right)^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}$$

Ce sont  $\varepsilon_{j,l,s} = \alpha \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$  où  $j$  peut prendre les valeurs  $|l - s| \leq j \leq l + s$ .

● Interaction  $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$

cette interaction est responsable de la **structure hyperfine** des spectres atomiques et en particulier de la célèbre raie de 21 cm de l'hydrogène.

$$\hat{h} = \alpha \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

est invariant par rotation. Il est même invariant dans des rotations qui n'agiraient que sur les espaces de spin puisque les moments orbitaux n'interviennent pas. Il est donc diagonal dans la base des états propres de  $\hat{S}^2$  et  $\hat{S}_z$  ( $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ ), comme on peut le vérifier en écrivant

$$\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{1}{2} \left[ \hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2 \right]$$

Dans le cas de deux spins  $\frac{1}{2}$ , les valeurs propres sont  $\varepsilon_s = \alpha \frac{\hbar^2}{2} \left[ s(s+2) - \frac{3}{2} \right]$ , c'est-à-dire

$\varepsilon = \alpha \frac{\hbar^2}{4}$  pour l'état triplet ( $s = 1$ ) et  $\varepsilon = -\frac{3\alpha\hbar^2}{4}$  pour l'état singulet ( $s = 0$ ).



Wigner



A. Clebsch



P. Gordan

