

TD7 : Opérateur moment cinétique et spin dans un champ magnétique

7.1 Opérateur moment cinétique

D'une façon générale, on appelle opérateur moment cinétique \vec{J} , un opérateur vectoriel dont les composantes vérifient les relations :

$$\begin{aligned} [\hat{J}_x, \hat{J}_y] &= i\hbar \hat{J}_z \\ [\hat{J}_z, \hat{J}_x] &= i\hbar \hat{J}_y \\ [\hat{J}_y, \hat{J}_z] &= i\hbar \hat{J}_x \end{aligned}$$

Soit, $\vec{J} \times \vec{J} = i\hbar \vec{J}$, rappelant qu'il s'agit ici d'un **opérateur vectoriel** et non d'un simple vecteur. Il est facile de montrer que l'opérateur \hat{J}^2 commute avec n'importe laquelle des composantes, en particulier \hat{J}_z . Appelons $|j, m\rangle$ les kets propres communs à \hat{J}^2 et \hat{J}_z (ces kets sont choisis orthonormés), et possèdent les valeurs propres respectives $\hbar^2 j(j+1)$ et $\hbar m$. On peut donc écrire

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

A ce stade, j est un réel positif ou nul (les valeurs propres du carré \hat{J}^2 le sont) et m est réel. On construit les opérateurs \hat{J}_+ et \hat{J}_- , adjoints l'un de l'autre, par la relation :

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y.$$

1. Vérifier que \hat{J}^2 commute bien avec \hat{J}_{\pm} , et que $[\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}] = \pm\hbar \hat{J}_{\pm}$.

Solution

$$\begin{aligned} [\hat{J}^2, \hat{J}_{\pm}] &= [\hat{J}^2, \hat{J}_x] \pm i[\hat{J}^2, \hat{J}_y] = 0 \pm i0 \\ [\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}] &= [\hat{J}_z, \hat{J}_x] \pm i[\hat{J}_z, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_y \pm \hbar \hat{J}_x = \pm\hbar \hat{J}_{\pm} \end{aligned}$$

2. Montrer que le(s) ket(s) $\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle$ est un vecteur propre de \hat{J}^2 et de \hat{J}_z , ou nul.

Solution

$$\hat{J}^2 \hat{J}_\pm |j, m\rangle = \hat{J}_\pm \hat{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 \hat{J}_\pm |j, m\rangle,$$

nous avons aussi

$$\hat{J}_z \hat{J}_\pm |j, m\rangle = (\hat{J}_\pm \hat{J}_z \pm \hbar \hat{J}_\pm) |j, m\rangle = (m \pm 1)\hbar \hat{J}_\pm |j, m\rangle.$$

Donc les kets $\hat{J}_\pm |j, m\rangle$ sont les vecteurs propres de \hat{J}^2 et \hat{J}_z avec leurs valeurs propres respectives $j(j+1)\hbar^2$ et $(m \pm 1)\hbar$, ou éventuellement nuls.

3. Calculer sa norme et en déduire l'inégalité : $-j \leq m \leq j$

Solution

Le carré de la norme s'écrit

$$\left\| \hat{J}_\pm |j, m\rangle \right\|^2 = \langle j, m | \hat{J}_\pm^\dagger \hat{J}_\pm | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}_\mp \hat{J}_\pm | j, m \rangle$$

or

$$\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm = (\hat{J}_x \mp i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \pm i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar \hat{J}_z$$

Il vient

$$\left\| \hat{J}_\pm |j, m\rangle \right\|^2 = j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 \mp m\hbar^2 = [j(j+1) - m(m \pm 1)]\hbar^2$$

Ces quantités sont nécessairement positives ou nulles ; on en déduit donc que $-j \leq m \leq j$.

4. Montrer par ailleurs que

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

Solution

Par construction, la base des vecteurs propres $|j, m\rangle$ est unique et donc $\hat{J}_\pm |j, m\rangle$ est colinéaire au ket $|j, m \pm 1\rangle$; compte tenu de sa norme on peut écrire :

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

. En particulier, si les états $|j, j \pm 1\rangle$ existent, on a $\hat{J}_\pm |j, j \pm 1\rangle = 0$.

5. Montrer qu'il est possible de construire la suite des états propres $|j, m\rangle$, $|j, m \pm 1\rangle$, $|j, m \pm 2\rangle$ par application répétée des opérateurs \hat{J}_+ et \hat{J}_- ; en déduire que $2j$ et $2m$ doivent être entiers, et que m peut prendre les $2j+1$ valeurs : $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$.

Solution

On voit ainsi que l'application de l'opérateur \hat{J}_{\pm} permet de passer de l'état $|j, m\rangle$ à l'état $|j, m \pm 1\rangle$. En appliquant cet opérateur de manière répétée, il est possible d'obtenir deux suites d'états propres : $|j, m+1\rangle, |j, m+2\rangle, \dots, |j, m+n\rangle$, et $|j, m-1\rangle, |j, m-2\rangle, \dots, |j, m-p\rangle$. Ici n et p sont des entiers naturels.

$m \leq j$: La première suite doit s'arrêter sous peine de voir $m' = m+n > j$. n doit donc vérifier la condition $m+n = j$, de manière à stopper avec $\hat{J}_+ |j, j\rangle = 0$.

On applique le raisonnement identique pour l'autre suite pour laquelle il existe un entier p vérifiant $m-p = -j$. En faisant la somme et la différence, on en déduit que $2m$, $(n-p)$ ainsi que $2j$ et $(n+p)$ sont des entiers.

Finalement, considérant une valeur de j pouvant être soit entière soit demi-entière, les valeurs possibles de m sont les $2j+1$ valeurs $j, -j-1, \dots, j-1, j$.

7.1.1 Harmoniques Sphériques

Considérons le cas où \vec{J} est le moment cinétique orbital d'une particule quantique (e.g électron, noyaux, ...) défini par la relation $\vec{J} = \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$.

On a alors :

$$L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \text{ etc...}$$

En coordonnées sphériques, L^2 et ses composantes ne dépendent que des angles θ et φ ; en particulier, L_z s'écrit simplement :

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Les kets propres $|l, m\rangle$ de L^2 et L_z ont alors une expression analytique, ce sont les harmoniques sphériques $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$

1. Vérifier que

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) \equiv F_{l,m}(\theta) e^{im\varphi}$$

Solution

Les $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ sont les fonctions propres de l'opérateur L_z avec $m\hbar$ comme valeur propre. On a donc :

$$-i\hbar \frac{\partial Y_{l,m}}{\partial \varphi} = m\hbar Y_{l,m}.$$

Sont solutions de cette équation l'ensemble des fonctions $Y_{l,m} = A e^{im\varphi}$, avec A une fonction dépendante de θ et de la forme $F_{l,m}(\theta)$.

2. En déduire que, pour un moment orbital, m est un entier (et donc l également).

Solution

Pour chaque coordonnées (x,y,z) , la fonction d'onde ne peut prendre qu'une seule valeur : Ceci est imposé par la condition $Y_{l,m}(\theta, \varphi+2\pi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, soit $e^{im2\pi} = 1$, ce qui implique que m soit entier. Finalement, les orbitales atomiques peuvent être représentées par les deux nombres quantiques m et l , l étant un entier naturel alors que m est un entier relatif avec la condition $-l \leq m \leq l$.

7.2 Principe de la résonance magnétique nucléaire (RMN)

On verra en cours que le noyau d'un atome possède un moment magnétique $\vec{\mu}$ qui est relié à son moment cinétique intrinsèque appelé spin \vec{J} (On note J sa valeur) : $\vec{\mu} = g\vec{J}$, où g est une constante. On suppose que le noyau est placé dans un champ magnétique uniforme dirigé suivant la direction Oz .

1. Ecrire le Hamiltonien \hat{H} associé à la description du processus d'interaction entre le noyau et le champ magnétique \vec{B} ?

Solution

L'Hamiltonien décrivant ce processus d'interaction peut s'écrire : $\hat{H} = -\vec{B} \cdot \vec{\mu} = -gB\hat{J}_z$

2. On rappelle que la valeur propre associée à \vec{J}^2 est $\hbar^2 j(j+1)$ où j est un entier positif ou nul. Combien y a-t-il d'états propres pour l'Hamiltonien \hat{H} ? Précisez les énergies propres associées.

Solution

Les états propres de \hat{H} sont donc ceux de \hat{J}_z . L'application de cet opérateur donne : $\hat{J}_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle$. Les valeurs propres E_m de \hat{H} sont donc : $E_m = -gBm\hbar$ avec $m = -j, \dots, +j$.

3. On suppose que le noyau est dans un état $\Psi(t)$ qui est une combinaison linéaire des états propres de \hat{H} . A partir des propriétés de commutation des composantes de \vec{J} , déterminer $\vec{\mu} \times \vec{\mu}$.

Solution

On suppose que la particule est dans un état $\Psi(t)$ défini comme une combinaison linéaire des états propres de \hat{H} . On a la relation $\vec{J} \times \vec{J} = i\hbar\vec{J}$, et donc $\vec{\mu} \times \vec{\mu} = i\hbar g\vec{\mu}$

4. Déterminer les quantités suivantes : $\frac{d\langle\mu_x\rangle}{dt}$, $\frac{d\langle\mu_y\rangle}{dt}$, and $\frac{d\langle\mu_z\rangle}{dt}$, en fonction des valeurs moyennes $\langle\mu_x\rangle$, $\langle\mu_y\rangle$ and $\langle\mu_z\rangle$. En déduire que l'on peut écrire :

$$\frac{d\langle\vec{\mu}\rangle}{dt} = \vec{\Omega} \times \langle\vec{\mu}\rangle$$

où $\vec{\Omega}$ est un vecteur que l'on interprétera. Relier $\hbar\vec{\Omega}$ à la distribution des états énergétiques discutés précédemment.

Solution

Ces quantités font intervenir des dérivées temporelles. L'évolution d'un opérateur peut être décrit par une relation de commutation grâce au théorème d'Ehrenfest qui appliqué à μ_i selon la composante i donne :

$$\frac{d\langle\vec{\mu}_i\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle[\mu_i, \hat{H}]\rangle$$

On a donc pour chaque coordonnée :

$$\begin{aligned}\frac{d\langle\mu_x\rangle}{dt} &= gB\langle\mu_y\rangle \\ \frac{d\langle\mu_y\rangle}{dt} &= -gB\langle\mu_x\rangle \\ \frac{d\langle\mu_z\rangle}{dt} &= 0\end{aligned}\tag{7.64}$$

Sous forme vectorielle, on peut écrire $\frac{d\langle\vec{\mu}\rangle}{dt} = (-g\vec{B}) \times \langle\vec{\mu}\rangle$.

On remarque donc que $\hbar g\vec{B}$ correspond à l'écart énergétique entre les sous niveaux $E_{m+1} - E_m = gB\hbar$

5. Quel est le lien avec une image classique du problème ?

Solution

Le moment magnétique effectue un mouvement de précession autour du champ magnétique avec une pulsation Ω . Une mesure de Ω permet donc de déterminer expérimentalement la constante g caractéristique du noyau. On peut donc associer à chaque type de noyau une fréquence de résonance propre Ω pour une valeur donnée du champ \vec{B} . Par exemple cette résonance est accordée à 42.57 MHz pour H , 17.24 MHz pour P ou encore 10.70 MHz pour C . Cette technique est donc utilisée pour détecter des éléments chimiques en très faibles concentrations. En imagerie (IRM), l'obtention du contraste d'un tissu repose sur la mesure du temps de relaxation des moments magnétiques excités localement par un champ B non uniforme dans le plan.

