Physique quantique

Postulats de la mécanique quantique : application au spin

1 Système à un spin : noyau atomique

On considère une modélisation rudimentaire d'un noyau atomique comme une particule de masse m, immobile dans l'espace, dont seul le spin $\vec{S}$ peut varier. L'état quantique du spin de ce noyau est décrit par le vecteur d'état : $|\psi\rangle = \alpha\,|{+z}\rangle + \beta\,|{-z}\rangle$, où $|{+z}\rangle$ et $|{-z}\rangle$ sont états propres de l'observable S_z, de valeurs propres respectives $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$.

Q1. Quel rôle jouent les états $|{+z}\rangle$ et $|{-z}\rangle$ lors d'une mesure de S_z ?

Q2. Exprimer, en fonction de α et β, la probabilité de trouver $\hbar/2$ lorsqu'on mesure la composante du spin selon S_z.

Q3. Déterminer les états propres de l'observable S_x.

Q4. Exprimer la probabilité de trouver $\hbar/2$ lorsqu'on mesure la composante du spin selon S_x.

Q5. Déterminer la valeur moyenne de S_z, d'abord en utilisant les probabilités calculées précédemment, ensuite en utilisant la formule du cours (cf. formulaire). Comparer.

On place le noyau dans un champ magnétique uniforme $\vec{B}$ dirigé selon l'axe Oz.

Q6. Quelle relation de proportionnalité existe entre le moment magnétique $\vec{M}$ et le spin $\vec{S}$?

Q7. Rappeler l'expression de l'énergie potentielle d'interaction entre un moment magnétique $\vec{M}$ et un champ magnétique $\vec{B}$.

Q8. En déduire l'expression de l'énergie potentielle V en fonction de l'amplitude B du champ magnétique et de la composante S_z du spin.

Q9. En déduire la matrice 2×2 de l'opérateur hamiltonien H représentant l'interaction entre le noyau et le champ magnétique.

Q10. En déduire l'évolution temporelle de l'état $|\psi(t)\rangle$, et l'évolution temporelle des probabilités de mesure de S_z et S_x.

Q11. On admet qu'en l'absence de champ magnétique, le proton se trouve sur le niveau fondamental E_0. Déterminer la position des deux nouveaux niveaux d'énergie résultant de l'apparition du champ magnétique $\vec{B}$, et pour chacun des 2 niveaux, indiquer l'état de spin correspondant.

Q12. En déduire la pulsation ω de l'onde électromagnétique capable, en interagissant avec le noyau, de faire basculer le spin de l'état $|{+z}\rangle$ à l'état $|{-z}\rangle$.

2 Système à deux spins : atome d'hydrogène

Nous nous intéressons ici au système à deux spins constitué par l'électron et le proton d'un atome d'Hydrogène. Ce système est à l'origine de la “structure hyperfine” de l'Hydrogène. Dans toute la suite, on fait abstraction de la localisation spatiale relative des particules, et l'on ne s'occupe que des degrés de liberté de spin. Chaque particule ayant deux états possibles de spin, à savoir $|+\rangle$ ou$|-\rangle$, il y a en tout quatre configuration possibles. L'une d'elles est $|p:+\rangle \otimes |e:-\rangle$ (que l'on note de manière compacte $|+-\rangle$, où il est entendu que le premier signe se réfère toujours au proton) correspondant au spin du proton orienté vers le “haut” et au spin de l'électron orienté vers le bas (lorsque l'axe n'est pas indiqué explicitement, il s'agira de l'axe Oz). On considère donc la base orthonormée des états du système $B_{pe} = \{|{+}{+}\rangle, |{+}{-}\rangle, |{-}{+}\rangle, |{-}{-}\rangle\}$.

Q13. On considère un état du système décrit par

$$|\psi\rangle = a\,|{+}{+}\rangle + b\,|{+}{-}\rangle + c\,|{-}{+}\rangle + d\,|{-}{-}\rangle$$

Quelle relation lient ces quatre coefficients ?
Indiquer :
- la probabilité que le proton ait un spin $|+\rangle$ et l'électron un spin $|-\rangle$.
- la probabilité que le proton et l'électron aient des spins antialignés.
- la probabilité que l'électron ait un spin $|-\rangle$ indépendamment de celui du proton.

On note $\vec{S}^p = (S^p_x, S^p_y, S^p_z)$ et $\vec{S}^e = (S^e_x, S^e_y, S^e_z)$ les observables de spin mesurant respectivement le spin du proton et celui de l'électron.

Q14. Par définition, l'observable S^p_x qui mesure la composante x du spin du proton s'écrit, dans la base B_{pe}, comme $S_x \otimes \mathbf{1}$. Donner son expression matricielle (cf. définition du produit tensoriel). Par analogie, donner l'expression matricielle de S^e_x.

L'objectif est désormais de déterminer la matrice de l'Hamiltonien d'interaction entre les moments magnétiques de spin de l'électron et du proton, puis de calculer les niveaux d'énergie du système. On admet que l'Hamiltonien d'interaction s'écrit $H = A\vec{S}^p \cdot \vec{S}^e$, où A est une constante positive., soit, sous forme matricielle, $H = A(S^p_x \otimes S^e_x + S^p_y \otimes S^e_y + S^p_z \otimes S^e_z)$.

Q15. Exprimer la matrice de H.

Q16. Montrer qu'il n'existe que deux niveaux d'énergie, dont un est dégénéré d'ordre 3. Déterminer les vecteurs propres correspondants. Lorsque la valeur propre est dégénérée, on cherchera les vecteurs propres les plus simples possibles.

Q17. Indiquer la valeur de la fréquence de résonance hyperfine en fonction de A.

Nous cherchons à fixer un ordre de grandeur à la constante A.

Q18. Rappeler la relation liant le spin et le moment magnétique de spin. On calculera numériquement la constante de proportionnalité dans les deux cas (électron et proton).

On rappelle qu'un moment magnétique $\vec{M}$ situé en O créé à une distance r un champ magnétique proportionnel à $M\mu_0/4\pi r^3$.

Q19. Quelle valeur approximative proposez-vous pour r ? En déduire un ordre de grandeur numérique de l'énergie potentielle d'interaction entre les moments magnétiques du proton et de l'électron, puis un ordre de grandeur de A, et finalement de la fréquence de résonance hyperfine correspondante. On donne $\mu_0 = 4\pi\ 10^{-7}$ S.I.

Quelques éléments de cours (postulats, spin)

Postulat 1 : l'état quantique de spin d'une particule est décrit par un vecteur $\psi(t) \in \mathcal{L}^2$, appelé "ket". La forme linéaire correspondante est appelée “bra” et notée $\langle\psi(t)|$. On détermine ses coordonnées par la relation $\langle\psi| = {}^T(|\psi\rangle)^* = |\psi\rangle^\dagger$.

Postulat 2 : on associe à chaque grandeur physique $\mathcal{A}$ une observable A : c'est un opérateur hermitique, i.e. tel que $A = A^\dagger$ (rappel : $A^\dagger$ est l'opérateur adjoint, défini comme ${}^T(A^*)$, i.e., c'est la matrice transposée de la conjuguée complexe de A).

Ex : L'opérateur hamiltonien est une observable qui mesure l'énergie mécanique d'une particule.

Rq : L'élément de matrice A_{ij} (ligne 'i', colonne 'j') de A dans la base $\{|\varphi_n\rangle, n \in \mathbb{N}\}$ est défini par :

$$A_{ij} = \langle\varphi_i| A |\varphi_j\rangle = \langle\varphi_j| A^\dagger |\varphi_i\rangle^*$$

Postulat 3 : La famille $\{|\varphi_n\rangle\}$ des vecteurs propres de l'observable A est orthonormée. Le spectre des valeurs propres $\{a_n\}$ représente l'ensemble des résultats possibles d'une mesure de $\mathcal{A}$.

Postulat 4 : La probabilité de trouver a_n lors d'une mesure de A, la particule étant juste **avant la mesure** dans l'état $|\psi\rangle$, est $|\langle\varphi_n|\,\psi\rangle|^2$.

Rq : grandeurs statistiques relatives aux résultats de N mesures de $\mathcal{A}$ ($N \to \infty$), la particule étant dans l'état $|\psi\rangle$:

- moyenne : $\langle A\rangle_\psi = \langle\psi| A |\psi\rangle$
- écart-type : $\delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}$

Postulat 5 : Réduction du paquet d'onde : après une mesure ayant effectivement donné la valeur a_n, l'état du système est $|\varphi_n\rangle$.

Niveaux d'énergie : Les états propres de l'Hamiltonien sont solutions de $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$. Les E_n représentent les niveaux d'énergie de la particule/du système.

Postulat 6 : l'évolution d'un système quantique est régie par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H|\psi(t)\rangle$$

Spin : moment cinétique intrinsèque d'une particule.

Observables de spin : $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$.

Représentation matricielle dans la base $\{|+z\rangle, |-z\rangle\}$:

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Annexe : résultats importants sur l'état quantique d'un système de particules, produit tensoriel

Soit un **système** constitué de deux particules 1 et 2, de vecteur d'état $|\varphi(1)\rangle \in \mathcal{E}_1$ et $|\varphi(2)\rangle \in \mathcal{E}_2$. L'état quantique **du système** est décrit dans l'espace *produit tensoriel* $\mathcal{E}_{12} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$. On note

$$|\psi\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle \in \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$$

un état du système.

Base orthonormée de l'espace produit : soient $|\varphi(1)\rangle = \sum_i a_i |u_i(1)\rangle$ et $|\varphi(2)\rangle = \sum_j b_j |v_j(2)\rangle$ les décompositions des vecteurs d'état de chaque particule sur une base orthonormée de leur espace d'état. Alors, par définition, on a la décomposition suivante du vecteur d'état **du système complet** :

$$|\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle = \sum_{i,j} a_i b_j |u_i(1)\rangle \otimes |v_j(2)\rangle$$

La famille $\{|u_i(1)\rangle \otimes |v_j(2)\rangle\}$ constitue une base orthonormée de l'espace produit.

Produit scalaire : le produit scalaire de deux vecteurs $|\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle$ et $|\varphi'(1)\rangle \otimes |\varphi'(2)\rangle$ de $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ est par définition le scalaire :

$$(\langle\varphi'(1)| \otimes \langle\varphi'(2)|) \,|\, (|\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle) = \langle\varphi'(1)|\, \varphi(1)\rangle \langle\varphi'(2)|\, \varphi(2)\rangle$$

Produit d'opérateurs/d'observables : Soit $A(1)$ opérant dans $\mathcal{E}_1$ et $B(2)$ opérant dans $\mathcal{E}_2$. Alors, par définition, l'opérateur noté $A(1)\otimes B(2)$ agit dans $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ de la manière suivante :

$$(A(1) \otimes B(2))(|\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle) = A(1)\,|\varphi(1)\rangle \otimes B(2)\,|\varphi(2)\rangle$$

En particulier, on appelle **extension de A(1) à l'espace produit** l'opérateur $\tilde{A} = A(1) \otimes \mathbf{1}(2)$.

Représentation matricielle d'un produit d'opérateurs : soit $A(1)_{ij}$ (resp. $B(2)_{kl}$) les éléments de matrice de l'opérateur $A(1)$ (resp. $B(2)$) dans une base orthonormée de $\mathcal{E}_1$ (resp. $\mathcal{E}_2$). Alors la matrice représentant l'opérateur $A(1) \otimes B(2)$ dans la base orthonormée de $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ construite par produit tensoriel des bases de $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ est le tenseur de rang 4 : $(A(1) \otimes B(2))_{ijkl} = A(1)_{ij} B(2)_{kl}$. Ceci résulte des deux définitions précédentes (produit scalaire, produit d'opérateurs).

Application des postulats au système constitué de deux particules : il suffit de construire les observables du système complet par produit tensoriel des observables de chacune des particules (en fonction de ce que l'expérience mesure effectivement, bien sûr...). Ensuite, les valeurs et vecteurs propres de ces observables permettent de déterminer les résultats possibles d'une mesure, les probabilités correspondantes...

Dans le cas (cf. TD) où la mesure ne porte que sur **une seule des deux particules**, l'observable correspondante est simplement **l'extension de l'observable** associée à la particule « mesurée » **à l'espace produit**.

Enfin, ces résultats se généralisent bien entendu au cas d'un système constitué de plus de deux particules.