

Le moment cinétique

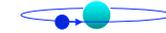
Chapitre 10

Pourquoi étudier le moment cinétique ? (1)

Recherche des états propres du problème coulombien (atome d'hydrogène)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + V(\hat{r})$$

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$



$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

La résolution d'une équation aux dérivées partielles à 3 dimensions est difficile !

On peut simplifier considérablement le problème en tirant parti de l'invariance par rotation du système

Pourquoi étudier le moment cinétique ? (2)

Premier pas vers l'étude du magnétisme :

Comme en physique classique, il existe en mécanique quantique une relation fondamentale entre le moment cinétique d'un système et son moment magnétique

Pour caractériser les propriétés magnétiques d'un atome, d'une particule, ..., il faut connaître son état de moment cinétique

cf. cours sur la physique du spin 1/2 et la résonance magnétique nucléaire

L'opérateur moment cinétique

Particule ponctuelle : moment cinétique en mécanique classique $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

Définition quantique formellement identique : opérateur à trois composantes

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

Action sur une fonction d'onde $\psi(x, y, z)$? On sait que $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$, donc :

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad \text{et de même pour } \hat{L}_x, \hat{L}_y$$

N.B. On s'intéresse ici au moment cinétique « orbital » pour la particule ponctuelle (on verra ensuite le moment cinétique « de spin »)

1.

Invariance par rotation et moment cinétique

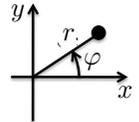
L'invariance par rotation

Invariance par rotation : rôle équivalent pour toutes les directions de l'espace

atome d'hydrogène :
$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Mathématiquement, on décrit cette invariance en introduisant l'opérateur rotation $\hat{R}_{\vec{u},\alpha}$ d'un angle α autour d'un axe \vec{u} donné

Exemple : rotation autour de l'axe z (coordonnées polaires à 2D)

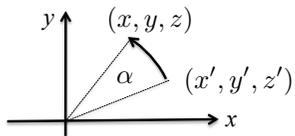


$$\psi_{\text{tournée}}(r, \varphi) = [\hat{R}_{z,\alpha}\psi](r, \varphi) = \psi(r, \varphi - \alpha)$$

→ \hat{H} est invariant par rotation si $\hat{H}\hat{R} = \hat{R}\hat{H}$

Opérateur rotation autour de Oz (coordonnées cartésiennes)

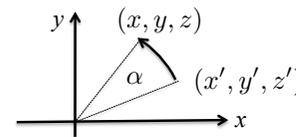
Rotation d'un angle α autour de l'axe Oz :



$$\begin{cases} x' = x \cos \alpha + y \sin \alpha \\ y' = -x \sin \alpha + y \cos \alpha \\ z' = z \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \psi_{\text{tournée}}(x, y, z) &= [\hat{R}_{z,\alpha}\psi](x, y, z) = \psi(x', y', z') \\ &= \psi(x \cos \alpha + y \sin \alpha, -x \sin \alpha + y \cos \alpha, z) \end{aligned}$$

Rotation infinitésimale autour de Oz : $\alpha \ll 1$



A l'ordre 1 en α
$$\begin{cases} x' \simeq x + \alpha y \\ y' \simeq -\alpha x + y \\ z' = z \end{cases}$$

$$\begin{aligned} [\hat{R}_{z,\alpha}\psi](x, y, z) &\simeq \psi(x + \alpha y, -\alpha x + y, z) \\ &\simeq \psi(x, y, z) + \alpha \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

c'est-à-dire : $\hat{R}_{z,\alpha} \simeq \hat{1} - \frac{i\alpha}{\hbar} \hat{L}_z$

$\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$: générateurs infinitésimaux du groupe des rotations

Invariance par rotation et moment cinétique

Si l'hamiltonien d'un problème 3D est invariant par rotation, il commute avec tous les opérateurs rotations, en particulier ceux associés à des petits angles.

$$[\hat{H}, \hat{L}_x] = 0 \quad [\hat{H}, \hat{L}_y] = 0 \quad [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

On peut donc chercher une base propre commune à $\{\hat{H}, \hat{L}_x\}$, ou à $\{\hat{H}, \hat{L}_y\}$, ou à $\{\hat{H}, \hat{L}_z\}$

Peut-on chercher une base propre commune aux 4 opérateurs $\{\hat{H}, \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z\}$?

Cela serait trop simple ! $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ ne commutent pas entre eux...

Les relation de commutation du moment cinétique

En utilisant les définitions

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

on montre que : $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$

De même : $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$ $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$

Interprétation géométrique claire :

les rotations autour des axes x, y et z ne commutent pas entre elles

On ne peut pas diagonaliser simultanément deux composantes de $\hat{\vec{L}}$

2.

Quels états propres pour le moment cinétique orbital ?

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$$

L'observable \hat{L}^2

Bien que \hat{L}_z ne commute pas avec \hat{L}_x et \hat{L}_y , on a : $[\hat{L}_z, \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2] = 0$
à montrer en exercice

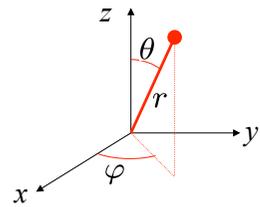
Par conséquent $[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$ où on a posé : $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

On peut donc diagonaliser simultanément \hat{L}^2 et une des trois observables :
 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$.

On choisit traditionnellement : $\{\hat{L}^2, \hat{L}_z\}$

Diagonalisation de $\{\hat{L}^2, \hat{L}_z\}$: l'approche fonction d'onde

On passe en coordonnées sphériques d'axe Oz et on cherche :



$$\hat{L}^2 \psi(r, \theta, \varphi) = \beta \psi(r, \theta, \varphi)$$

$$\hat{L}_z \psi(r, \theta, \varphi) = \gamma \psi(r, \theta, \varphi)$$



Legendre (1752-1833)
harmoniques sphériques

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

Diagonalisation de \hat{L}_z dans l'approche fonction d'onde

On doit résoudre $\hat{L}_z \psi(\vec{r}) = \gamma \psi(\vec{r})$
 $\gamma = m\hbar$, m nombre sans dimension

$$\hat{L}_z \psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial \varphi}$$

$$\frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial \varphi} = im \psi(\vec{r}) \quad \rightarrow \quad \psi(\vec{r}) = e^{im\varphi} F(r, \theta)$$

Attention : $\psi(r, \theta, \varphi + 2\pi) = \psi(r, \theta, \varphi) \rightarrow m$ entier

Les valeurs propres sont donc de la forme $m\hbar$, m entier

et les fonctions propres associées sont $\psi(r, \theta, \varphi) = e^{im\varphi} F(r, \theta)$

Remarque sur les variables pertinentes

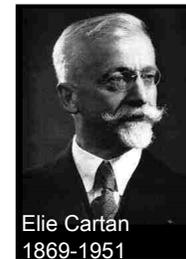
Les opérateurs \hat{L}_z, \hat{L}^2 ne font intervenir que les variables θ, φ et pas r .

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\dots \frac{\partial}{\partial \theta} \dots \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

Imposer à $\psi(r, \theta, \varphi)$ d'être état propre de \hat{L}_z, \hat{L}^2 permettra de déterminer la dépendance en θ, φ , mais pas la dépendance en r

$$\psi(r, \theta, \varphi) = Y(\theta, \varphi) R(r) \quad Y(\theta, \varphi) : \text{harmoniques sphériques}$$

La dépendance en r viendra ultérieurement, lorsqu'on aura précisé l'hamiltonien, en particulier le potentiel $V(r)$



Elie Cartan
1869-1951

Diagonalisation de $\{\hat{L}^2, \hat{L}_z\}$: la méthode algébrique

On travaille uniquement avec les relations de commutation :

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \dots$$

plus facile que la méthode « fonction d'onde »

Intérêt supplémentaire :

la méthode suivie ne s'applique pas seulement à $\hat{L} = \vec{r} \times \hat{p}$

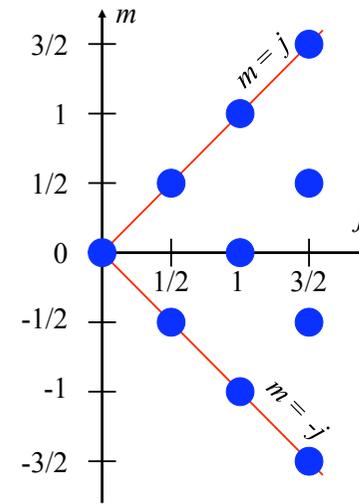
mais aussi à d'autres observables comme : $\hat{J} = \sum_{n=1}^N \hat{L}_n = \sum_{n=1}^N \vec{r}_n \times \hat{p}_n$

pour un système composite, ou à d'autres moments cinétiques sans équivalent classique (spin).

3.

Le problème général
d'une observable de moment cinétique

$$\hat{\vec{J}} = \{ \hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z \}$$



Les valeurs propres de \hat{J}^2 et \hat{J}_z

j	m	val. prop. de \hat{J}^2	val. prop. de \hat{J}_z
0	0	0	0
1/2	1/2 -1/2	$3\hbar^2/4$	$\hbar/2$ $-\hbar/2$
1	1 0 -1	$2\hbar^2$	\hbar 0 $-\hbar$

4.

Retour sur le moment cinétique orbital

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \quad |j, m\rangle \rightarrow |\ell, m\rangle$$

Les harmoniques sphériques $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$

La fonction propre commune à \hat{L}^2 et \hat{L}_z , associée aux valeurs propres $\ell(\ell+1)\hbar^2$ et $m\hbar$ est notée :

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$$



On la choisit normée : $\int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi |Y_{\ell,m}(\theta, \phi)|^2 = 1$

Après la méthode algébrique, on s'attendrait à ce que ℓ et m puissent être entiers ou demi-entiers, mais....

ℓ et m doivent être entiers

Au paragraphe 1, nous avons résolu l'équation aux valeurs propres pour \hat{L}_z .
Nous avons trouvé la dépendance en φ des fonctions propres de la forme :

$$e^{im\varphi}$$

La contrainte des coordonnées sphériques $\psi(r, \theta, \varphi + 2\pi) = \psi(r, \theta, \varphi)$
impose alors

$$m \text{ entier}$$

Cette contrainte s'applique en particulier aux harmoniques sphériques :

$$Y_{\ell,m}(\theta, \varphi + 2\pi) = Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$$

$$m \text{ entier et } \ell - m \text{ entier} \quad \longrightarrow \quad \ell \text{ entier}$$

Exemple d'harmoniques sphériques : les états de moment cinétique nul

On part de $\ell = m = 0$ et on cherche $Y_{0,0}(\theta, \phi)$ telle que

$$\hat{L}_z Y_{0,0}(\theta, \varphi) = 0 \quad \hat{L}_+ Y_{0,0}(\theta, \varphi) = 0$$

$$\text{avec : } \hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

On en déduit : $Y_{0,0}(\theta, \phi) = \text{constante}$

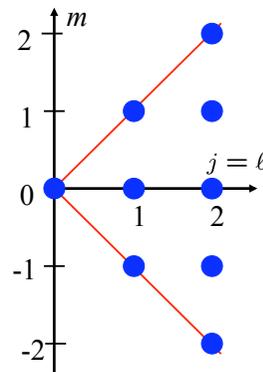
$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \quad \text{état à symétrie sphérique (état s)}$$

Les harmoniques sphériques (suite)

Moment cinétique 1 : $Y_{\ell=1,m}(\theta, \varphi)$

états p

$$\begin{array}{l}
 |\ell = 1, m\rangle \rightarrow \begin{cases} |\ell = 1, m = 1\rangle & \sin \theta e^{i\varphi} \\ |\ell = 1, m = 0\rangle & \cos \theta \\ |\ell = 1, m = -1\rangle & \sin \theta e^{-i\varphi} \end{cases}
 \end{array}$$



cf. orbitales p_x, p_y, p_z
des chimistes

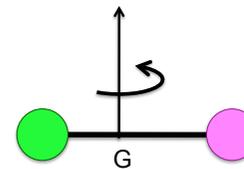
Un exemple : la rotation de molécules di-atomiques

Les degrés de liberté d'une molécule :



Vibration (vue pour la molécule CO) :
spectre d'un oscillateur harmonique,
avec des niveaux équidistants

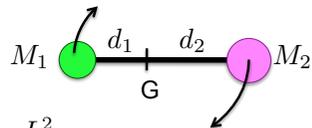
$$h\nu \sim 50 \text{ à } 500 \text{ meV}$$



Rotation de la molécule : quel spectre ?

Quel spectre pour le mouvement de rotation ?

Molécule \approx rotateur rigide



Classiquement, l'énergie de rotation s'écrit : $E = \frac{L^2}{2I}$

$I = M_1 d_1^2 + M_2 d_2^2$: moment d'inertie de la molécule

Hamiltonien quantique : $\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$

On attend donc des niveaux d'énergie repérés par le nombre quantique ℓ

$$E_\ell = \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2I}$$

Mise en évidence de ce spectre

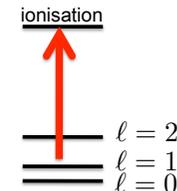
Laboratoire Aimé Cotton, Orsay : gaz froid d'atomes de césium

Assemblée d'atomes refroidis par laser (température 100 microK)

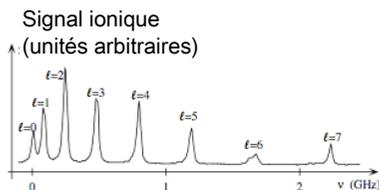


Au sein de ce gaz d'atomes, des molécules di-atomiques peuvent se former

- On détecte les molécules en les ionisant avec un laser et en mesurant le courant d'ions produits
- En changeant la fréquence du laser, on balaye les différents niveaux d'énergie possibles de la molécule



Exemple de spectre de rotation (molécule Cs₂)



On peut vérifier que

$$E_\ell - E_{\ell-1} \propto \ell$$

caractéristique d'un spectre de rotation

$$\frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2I} - \frac{\hbar^2 (\ell - 1)\ell}{2I} = \frac{\hbar^2 \ell}{I}$$

Fréquence caractéristique : 1 GHz (énergie de quelques microeV)

- Les énergie liées à la rotation des molécules sont généralement plus basses que celles associées à la vibration
- Ici, l'effet est renforcé par le fait que la molécule est produite dans un état « excité », avec une grande distance entre atomes : $R = 13 \text{ \AA}$

Que penser des valeurs 1/2 entières de j ?

Valeurs éliminées pour le moment cinétique orbital en raison de :

$$\psi(r, \theta, \varphi + 2\pi) = \psi(r, \theta, \varphi)$$

Artefact ou indication d'un "monde" plus vaste ?

la physique du spin 1/2