

Mécanique Quantique I, Corrigé 11

Assistants : joseph.saliba@epfl.ch & pierre.lugan@epfl.ch

Exercice 1 : Produit tensoriel de deux spins $\frac{1}{2}$

Nous considérons un système composé de deux spins $\frac{1}{2}$: \mathbf{S}_1 et \mathbf{S}_2 .

1. Suivant l'indication de l'énoncé, nous choisissons, comme base pour les états du spin S_1 , la base des vecteurs propres de l'opérateur S_1^z , c'est-à-dire $\mathcal{B}_1 = \{|\uparrow\rangle_1, |\downarrow\rangle_1\}$. Dans cette base, on retrouve les formules classiques exprimant les opérateurs de spin recherchés en fonction des matrices de Pauli.

$$S_1^x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_1^y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_1^z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Il faut se souvenir que pour ces matrices, la convention est par exemple, $\uparrow\uparrow$

$$S^x = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | S^x | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | S^x | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | S^x | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | S^x | \downarrow \rangle \end{pmatrix} = \frac{\begin{array}{c|cc} & |\uparrow\rangle_1 & |\downarrow\rangle_1 \\ \hline \uparrow & 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \hline \downarrow & \frac{\hbar}{2} & 0 \end{array}}{1}.$$

Les opérateurs du spin S_2 ont la même forme dans la base \mathcal{B}_2 .

2. Puisque chaque spin est complètement décrit par les deux états $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$, pour décrire le système constitué par deux spins, nous avons besoin de 4 états
 - $|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$: les deux spins sont *up*.
 - $|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$: le spin S_1 est *up* et le spin S_2 *down*.
 - $|\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$: le spin S_1 est *down* et le spin S_2 *up*.
 - $|\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$: les deux spins sont *down*.

Le symbole \otimes représente le produit tensoriel, indiquant que le système total est composé de 2 espaces de Hilbert indépendants, \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_2 , et que la dimension de l'espace Hilbert total \mathcal{H} est le produit des dimensions de ces 2 espaces indépendants. Pour simplifier la notation, on introduit

$$\begin{aligned} |\uparrow\uparrow\rangle &\equiv |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 \\ |\uparrow\downarrow\rangle &\equiv |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 \\ |\downarrow\uparrow\rangle &\equiv |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 \\ |\downarrow\downarrow\rangle &\equiv |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2. \end{aligned}$$

À partir de maintenant, on note la base $\mathcal{B} = \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$. L'ordre ici choisi est purement conventionnel. Dans le cas présent, nous avons donc en notation matricielle $\langle \uparrow\uparrow | = (1 \ 0 \ 0 \ 0)$, \dots , et $\langle \downarrow\downarrow | = (0 \ 0 \ 0 \ 1)$.

3. Pour cette question, il suffit simplement de faire agir les opérateurs des spins sur les 4 états de base \mathcal{B} selon les règles habituelles. Les opérateurs agissent dans l'espace de Hilbert total $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ comme

$$S_1^\alpha \rightarrow \frac{\hbar}{2} \sigma_1^\alpha \otimes \mathbf{1}_{\mathcal{B}_2} \quad S_2^\alpha \rightarrow \mathbf{1}_{\mathcal{B}_1} \otimes \frac{\hbar}{2} \sigma_2^\alpha,$$

où $\alpha = x, y, z$ et $\mathbf{1}_{\mathcal{B}_1}$ ($\mathbf{1}_{\mathcal{B}_2}$) est la matrice d'identité dans la base \mathcal{B}_1 (\mathcal{B}_2). Par exemple

$$\begin{aligned} S_1^x |\uparrow\uparrow\rangle &= (S_1^x \otimes \mathbf{1}_{\mathcal{B}_2})(|\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2) = (S_1^x |\uparrow\rangle_1) \otimes (\mathbf{1}_{\mathcal{B}_2} |\uparrow\rangle_2) = \frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 = \frac{\hbar}{2} |\downarrow\uparrow\rangle \\ S_1^y |\uparrow\uparrow\rangle &= (S_1^y \otimes \mathbf{1}_{\mathcal{B}_2})(|\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2) = (S_1^y |\uparrow\rangle_1) \otimes (\mathbf{1}_{\mathcal{B}_2} |\uparrow\rangle_2) = \frac{i\hbar}{2} |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 = \frac{i\hbar}{2} |\downarrow\uparrow\rangle \\ S_1^z |\uparrow\uparrow\rangle &= (S_1^z \otimes \mathbf{1}_{\mathcal{B}_2})(|\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2) = (S_1^z |\uparrow\rangle_1) \otimes (\mathbf{1}_{\mathcal{B}_2} |\uparrow\rangle_2) = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

De la même manière, on a pour les composantes du spin S_2

$$S_2^x |\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\downarrow\rangle, \quad S_2^y |\uparrow\uparrow\rangle = \frac{i\hbar}{2} |\uparrow\downarrow\rangle, \quad S_2^z |\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\uparrow\rangle.$$

Si l'on récapitule tous les éléments possibles dans un tableau, on obtient

	$ \uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\rangle$
S_1^x	$\frac{\hbar}{2} \downarrow\uparrow\rangle$	$\frac{\hbar}{2} \downarrow\downarrow\rangle$	$\frac{\hbar}{2} \uparrow\uparrow\rangle$	$\frac{\hbar}{2} \uparrow\downarrow\rangle$
S_1^y	$i\frac{\hbar}{2} \downarrow\uparrow\rangle$	$i\frac{\hbar}{2} \downarrow\downarrow\rangle$	$-i\frac{\hbar}{2} \uparrow\uparrow\rangle$	$-i\frac{\hbar}{2} \uparrow\downarrow\rangle$
S_1^z	$\frac{\hbar}{2} \uparrow\uparrow\rangle$	$\frac{\hbar}{2} \uparrow\downarrow\rangle$	$-\frac{\hbar}{2} \downarrow\uparrow\rangle$	$-\frac{\hbar}{2} \downarrow\downarrow\rangle$
S_2^x	$\frac{\hbar}{2} \uparrow\downarrow\rangle$	$\frac{\hbar}{2} \uparrow\uparrow\rangle$	$\frac{\hbar}{2} \downarrow\downarrow\rangle$	$\frac{\hbar}{2} \downarrow\uparrow\rangle$
S_2^y	$i\frac{\hbar}{2} \uparrow\downarrow\rangle$	$-i\frac{\hbar}{2} \uparrow\uparrow\rangle$	$i\frac{\hbar}{2} \downarrow\downarrow\rangle$	$-i\frac{\hbar}{2} \downarrow\uparrow\rangle$
S_2^z	$\frac{\hbar}{2} \uparrow\uparrow\rangle$	$-\frac{\hbar}{2} \uparrow\downarrow\rangle$	$\frac{\hbar}{2} \downarrow\uparrow\rangle$	$-\frac{\hbar}{2} \downarrow\downarrow\rangle$

Les éléments de ce tableau sont les éléments des matrices représentant les opérateurs S_1^α et S_2^α dans la base \mathcal{B} . On obtient finalement

$$S_1^x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_1^y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_1^z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$S_2^x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_2^y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_2^z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Remarques

Afin de simplifier les calculs des matrices on peut appliquer les propriétés suivantes

- Puisque tous les opérateurs du spin $S_{1,2}^\alpha$ sont hermitiens, il suffit de calculer la moitié supérieure, c'est-à-dire, par exemple $\langle i|S_1^x|j\rangle$ avec $i \leq j$.
- Les seuls éléments de matrice de S_1^α (S_2^α) qui sont non nuls, sont ceux qui impliquent le même état du spin S_2 (S_1), par exemple

$$\langle \uparrow i|S_1^\alpha|\uparrow j\rangle = \langle \uparrow|S_1^\alpha|\uparrow\rangle \otimes \langle i|j\rangle = 0, \quad \text{si } i \neq j.$$

- On note que l'on peut obtenir les matrices du spin S_2 à partir de celles du spin S_1 si on échange le deuxième et le troisième vecteur de la base \mathcal{B} (Si on échange les spins S_1 et S_2 , $|ij\rangle \rightarrow |ji\rangle$, les vecteurs $|\uparrow\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\downarrow\rangle$ ne changent pas, mais on a $|\uparrow\downarrow\rangle \rightarrow |\downarrow\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow\downarrow\rangle$).

4. Si l'on développe

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_1$$

Comme tous les opérateurs du spin S_1 commutent avec ceux de S_2 , ($[S_1^i, S_2^j] = 0$ pour tout $i, j = \{x, y, z\}$) car ils n'agissent pas sur le même spin,

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 &= \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \\ &= \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y + S_1^z S_2^z) \end{aligned}$$

Il est pratique de remplacer les opérateurs S_1^x, S_1^y (S_2^x, S_2^y) en fonction des opérateurs S_1^+, S_1^- (S_2^+, S_2^-) avec les relations

$$\begin{aligned} S_j^x &= \frac{1}{2}(S_j^+ + S_j^-) \\ S_j^y &= \frac{1}{2i}(S_j^+ - S_j^-) \end{aligned}$$

pour $j = 1, 2$. On trouve

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2S_1^z S_2^z + S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+$$

Nous allons écrire les matrices correspondant à ces opérateurs. Comme il s'agit de spins 1/2, on a $\mathbf{S}_1^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)\hbar^2 \mathbf{1}_{\mathcal{B}_1}$, et $\mathbf{S}_2^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)\hbar^2 \mathbf{1}_{\mathcal{B}_2}$. Par conséquent, dans la base \mathcal{B}

$$\mathbf{S}_1^2 = \mathbf{S}_2^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} \mathbf{1}_{\mathcal{B}} \quad .$$

Il est facile de déterminer les matrices des autres opérateurs en les faisant agir sur les vecteurs de la base. Par exemple on a

$$\begin{aligned} S_1^+ S_2^- | \uparrow \uparrow \rangle &= S_1^+ (\hbar | \uparrow \downarrow \rangle) = 0 \\ S_1^+ S_2^- | \uparrow \downarrow \rangle &= S_1^+ (0) = 0 \\ S_1^+ S_2^- | \downarrow \uparrow \rangle &= S_1^+ (\hbar | \downarrow \downarrow \rangle) = \hbar^2 | \uparrow \downarrow \rangle \\ S_1^+ S_2^- | \downarrow \downarrow \rangle &= S_1^+ (0) = 0 \end{aligned}$$

On en déduit la matrice de l'opérateur $S_1^+ S_2^-$ dans la base \mathcal{B}

$$S_1^+ S_2^- = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

On obtient de même

$$S_1^- S_2^+ = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

et

$$S_1^z S_2^z = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

En additionnant, nous obtenons la matrice de l'opérateur \mathbf{J}^2

$$\mathbf{J}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} .$$

5. Afin de trouver les vecteurs propres $|\psi_i\rangle$ et les valeurs propres λ_i avec ($i = 1, \dots, 4$) de cette matrice, on note qu'elle est diagonale par bloc. Cela veut dire que les sous-espaces $\mathcal{C}_1 = \{|\uparrow\uparrow\rangle\}$, $\mathcal{C}_{23} = \{|\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle\}$ et $\mathcal{C}_4 = \{|\downarrow\downarrow\rangle\}$ sont invariants sous l'action de \vec{J}^2 (car tous les éléments de matrice entre eux sont nuls). Ainsi, pour diagonaliser la matrice, il suffit de diagonaliser séparément la restriction de \vec{J}^2 dans chaque sous-espace. Dans la pratique, dans \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_4 , cela revient simplement

à dire que $|\psi_1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ (avec $\lambda_1 = 2\hbar^2$) et $|\psi_4\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$ (avec $\lambda_4 = 2\hbar^2$) sont vecteurs propres. Dans \mathcal{C}_{23} , il nous reste à chercher deux vecteurs propres $\{|\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle\}$ combinaisons linéaires de $|\uparrow\downarrow\rangle$ et $|\downarrow\uparrow\rangle$.

Pour cela, on diagonalise simplement la matrice $\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$, qui agit dans le sous-espace \mathcal{C}_{23} . On trouve

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

avec $\lambda_2 = 2\hbar^2$, et

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

avec $\lambda_3 = 0$. On a donc trois vecteurs propres $\{|\uparrow\uparrow\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), |\downarrow\downarrow\rangle\}$ avec la même valeur propre $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_4 = 2\hbar^2$, et un vecteur propre $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ avec $\lambda_3 = 0$. On peut vérifier que ces vecteurs sont orthonormaux.

L'opérateur $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2)$ a pour valeurs propres $-3\hbar^2/4$ et $\hbar^2/4$. Notons que les opérateurs \mathbf{J}^2 et $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ ont les mêmes vecteurs propres.

Remarques

- (a) Puisque $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ et $|\psi_4\rangle$ ont la même valeur propre, chaque combinaison linéaire de ces trois vecteurs est aussi un vecteur propre de \mathbf{J}^2 avec la même valeur propre. En fait, il y a une infinité de choix de vecteurs propres possibles (mais pour former une base orthonormale, ils doivent être 2 à 2 orthonormaux).
- (b) Les trois états $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ et $|\psi_4\rangle$ sont appelés les états triplet et $|\psi_3\rangle$ l'état singulet. Cette appellation devient claire si l'on se pose la question du spin de ces 4 états. Par exemple, quel est le spin j de l'état $|\uparrow\uparrow\rangle$? D'après le calcul précédent, la valeur propre de \mathbf{J}^2 pour les 3 états triplets est $2\hbar^2$. Or par définition d'un moment cinétique, cette valeur est égale à $j(j+1)\hbar^2$ où j est le nombre quantique de spin. On en déduit que les 3 états triplet sont des états de spin 1 et le singulet un état de spin 0.
- Autrement dit la somme de 2 spins $\frac{1}{2}$, donne 3 états de spin 1 et un état de spin 0.
- (c) Si l'on va un pas plus loin et que l'on se pose la question de la valeur de la projection j_z du spin de ces états propres suivant z , on trouve que les états $|\psi_i\rangle$ ($i = 1, \dots, 4$) sont tous vecteurs propres de l'opérateur $J^z = S_1^z + S_2^z$ pour les valeurs propres respectives \hbar , 0, 0, et $-\hbar$.

Une autre manière de voir les états propres précédents est donc de les représenter par le ket $|j, j_z\rangle$. On obtient alors

$$\begin{aligned} |1,1\rangle &\equiv |j=1, j_z=1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1,0\rangle &\equiv |j=1, j_z=0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1,-1\rangle &\equiv |j=1, j_z=-1\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \\ |0,0\rangle &\equiv |j=0, j_z=0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \end{aligned}$$

- (d) Une différence, apparemment anecdotique mais aux conséquences considérables, entre les états triplet et singulet est que les premiers sont symétriques par permutation de spins (si l'on remplace le spin 1 par le spin 2 et vice-versa, on obtient le même état) alors que le singulet est antisymétrique (la même permutation donne l'état opposé). Néanmoins, ce n'est que lorsque l'on prendra en compte le principe de Pauli, que l'on sera en mesure d'appréhender le rôle capital de cette symétrie pour la physique des systèmes à N particules en interaction.

6. Nous avons

$$\begin{aligned} P_t|11\rangle &= \hbar^2|11\rangle \\ P_t|10\rangle &= \hbar^2|10\rangle \\ P_t|1-1\rangle &= \hbar^2|1-1\rangle \\ P_t|00\rangle &= 0 \end{aligned}$$

L'opérateur P_t/\hbar^2 est par conséquent un projecteur sur le sous-espace $j = 1$ de l'espace de Hilbert \mathcal{H} .

$$\begin{aligned} P_s|11\rangle &= 0 \\ P_s|10\rangle &= 0 \\ P_s|1-1\rangle &= 0 \\ P_s|00\rangle &= \hbar^2|00\rangle \end{aligned}$$

L'opérateur P_s/\hbar^2 est par conséquent un projecteur sur le sous-espace $j = 0$ de l'espace de Hilbert \mathcal{H} .

$$\begin{aligned} P_e|11\rangle &= \hbar^2|11\rangle \\ P_e|10\rangle &= \hbar^2|10\rangle \\ P_e|1-1\rangle &= \hbar^2|1-1\rangle \\ P_e|00\rangle &= -\hbar^2|00\rangle \end{aligned}$$

L'opérateur P_e/\hbar^2 est l'opérateur d'échange des deux spins.

7. L'opérateur N_\uparrow (N_\downarrow) compte le nombre des spins *up* (*down*). On a

$$\begin{aligned} N_\uparrow|\uparrow\uparrow\rangle &= 2|\uparrow\uparrow\rangle \\ N_\uparrow|\uparrow\downarrow\rangle &= 1|\uparrow\downarrow\rangle \\ N_\uparrow|\downarrow\uparrow\rangle &= 1|\downarrow\uparrow\rangle \\ N_\uparrow|\downarrow\downarrow\rangle &= 0|\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

et pareillement pour N_\downarrow . Donc, les opérateurs N_\uparrow et N_\downarrow sont diagonaux dans la base \mathcal{B} avec les formes suivantes

$$\begin{aligned} N_\uparrow &= \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ N_\downarrow &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

On observe que $J^z = \frac{\hbar}{2}(N_\uparrow - N_\downarrow)$.

8. Par définition de S_i^+ et S_i^- , on a

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_1^z S_2^z + \frac{1}{2}(S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+) .$$

Le terme $S_1^z S_2^z$ est diagonal et par conséquent conserve N_\uparrow et N_\downarrow (c'est-à-dire que les valeurs N_\uparrow et N_\downarrow sont les mêmes pour les états $|\psi\rangle$ et $S_1^z S_2^z |\psi\rangle$ pour chaque $|\psi\rangle$ dans \mathcal{B}). Les opérateurs S_1^+ et S_2^+ augmentent N_\uparrow et font diminuer N_\downarrow , alors que les opérateurs S_1^- et S_2^- augmentent N_\downarrow et font diminuer N_\uparrow , par conséquent les termes $S_1^+ S_2^-$ et $S_2^+ S_1^-$ conservent N_\uparrow et N_\downarrow .

Exercice 2 : Particule dans un piège sphérique

1. Le hamiltonien est donné par :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (1)$$

En utilisant les résultats du cours on peut aisément écrire la projection de l'équation de Schrödinger sur la base $|\vec{x}\rangle$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi(\vec{x})) + \frac{1}{2mr^2} \mathbf{L}^2 \Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x}) \quad (2)$$

où $\mathbf{L}^2 \Psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \hat{\mathbf{L}}^2 | \Psi \rangle$.

2. Sachant que \hat{L}_z , $\hat{\mathbf{L}}^2$ et \hat{H} commutent tous entre eux, on peut diagonaliser ces opérateurs dans une base commune. Il a été montré au cours que l'on peut trouver une base $|\Psi\rangle$ pour laquelle $\hat{L}_z |\Psi\rangle = \hbar m |\Psi\rangle$ et $\hat{\mathbf{L}}^2 |\Psi\rangle = \hbar^2 l(l+1) |\Psi\rangle$ où m et l sont des entiers. Les harmoniques sphériques réalisent cette base et sont donc caractérisées par le fait suivant :

$$\langle \theta, \varphi | \hat{\mathbf{L}}^2 | Y_l^m \rangle = \mathbf{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (3)$$

On a donc $\langle \vec{x} | \hat{\mathbf{L}}^2 | \Psi \rangle = \hbar^2 l(l+1) \Psi(r, \theta, \varphi)$ si $\Psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$. En factorisant la partie angulaire $Y_l^m(\theta, \varphi)$ dans l'équation de Schrödinger, on obtient donc pour la partie radiale $\psi(r)$ l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi_l^m(r)) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \psi_l^m(r) = E\psi_l^m(r). \quad (4)$$

Comme la solution de l'équation précédente dépend de l , on note $\psi(r) = \psi_l(r)$ les solutions. Si l'on effectue la dérivée seconde selon r , on obtient l'équation suivante :

$$\psi_l''(r) + 2\frac{\psi_l'(r)}{r} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \psi_l(r) = 0 \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (5)$$

La seule contrainte due au potentiel est que $\psi_l(R) = 0$.

3. Dans le cas $l = 0$,

(a) En constatant que $\psi_0(r)$ n'entre dans l'équation différentielle que dans la combinaison $r\psi_0(r)$, on trouve immédiatement

$$(r\psi_0)'' + k^2 r\psi_0 = 0 \quad \rightarrow \quad r\psi_0(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr) \quad (6)$$

La fonction d'onde $\psi_0(r)$ doit être continue en $r = 0$, ce qui nous oblige à enlever le terme en cosinus qui diverge lorsque $r \rightarrow 0$.

(b) Lorsque l'on impose $\psi_0(R) = 0$, on trouve que k est restreint à prendre des valeurs telles que $kR = n\pi$ avec $n \in \mathbb{N}^*$. On trouve donc

$$E_n^{l=0} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{R} \right)^2 \quad (7)$$

(c) Voir page 8.

4. Dans le cas $l \neq 0$,

(a) Pour des r petits, on peut laisser tomber le terme en k^2 et l'on a alors $s(s-1) + 2s - l(l+1) = 0$ et donc soit $s = l$, soit $s = -l - 1$. Afin que la fonction d'onde ne diverge pas, on est contraint à sélectionner la solution $s = l$.

(b) Si l'on introduit $\lambda_l(r) = r^{-l} \psi_l(r)$ afin de prendre en compte le comportement asymptotique trouvé au point précédent, on a :

$$\psi_l' = lr^{l-1} \lambda_l + r^l \lambda_l' \quad \text{et} \quad \psi_l'' = l(l-1)r^{l-2} \lambda_l + 2lr^{l-1} \lambda_l' + r^l \lambda_l'' \quad (8)$$

En faisant la substitution dans l'équation pour $\psi_l(r)$ on trouve immédiatement

$$\lambda_l'' + 2(l+1) \frac{\lambda_l'}{r} + k^2 \lambda_l = 0 \quad (9)$$

(c) Si l'on prend la dérivée de l'équation précédente et qu'on la divise par r , on trouve :

$$\frac{\lambda_l'''}{r} + 2(l+1)\frac{1}{r}\left(\frac{\lambda_l'}{r}\right)' + k^2\frac{\lambda_l'}{r} = 0 \quad (10)$$

En utilisant le fait que

$$\left(\frac{\lambda_l'}{r}\right)'' = \frac{\lambda_l'''}{r} - \frac{2}{r}\left(\frac{\lambda_l'}{r}\right)' \quad (11)$$

L'équation précédente devient :

$$\left(\frac{\lambda_l'}{r}\right)'' + 2(l+2)\frac{1}{r}\left(\frac{\lambda_l'}{r}\right)' + k^2\frac{\lambda_l'}{r} = 0 \quad (12)$$

On observe donc que $\lambda_{l+1} \propto \lambda_l'/r$. On obtient donc une relation de récurrence :

$$\lambda_l \propto \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)^l \lambda_0 \quad (13)$$

(d) On obtient donc :

$$\psi_l(r) = A_l r^l \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)^l \psi_0(r) \quad (14)$$

puisque $\lambda_0 = \psi_0$. Le fait que $\psi_l(r)$ ne doive pas diverger quand $r \rightarrow 0$ implique à nouveau qu'il faut enlever le terme en cosinus dans ψ_0 . Les $\psi_l(r)$ sont les fonctions de Bessel sphériques :

$$\psi_l(r) = A_l r^l \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)^l \frac{\sin(kr)}{r} \quad (15)$$

(e) On a

$$\psi_1(r) \propto \partial_r \psi_0(r) \propto \frac{\cos(kr)kr - \sin(kr)}{r^2} \quad (16)$$

Exiger $\psi_1(R) = 0$ revient à sélectionner les k satisfaisant

$$\tan(kR) = kR \quad (17)$$

Les énergies sont donc à nouveau quantifiées et chaque niveau d'énergie a pour dégénérescence $2l+1=3$ puisque pour $l=1$, m peut prendre les valeurs $-l=-1$, 0 et $l=1$.

(f) Voir page suivante.

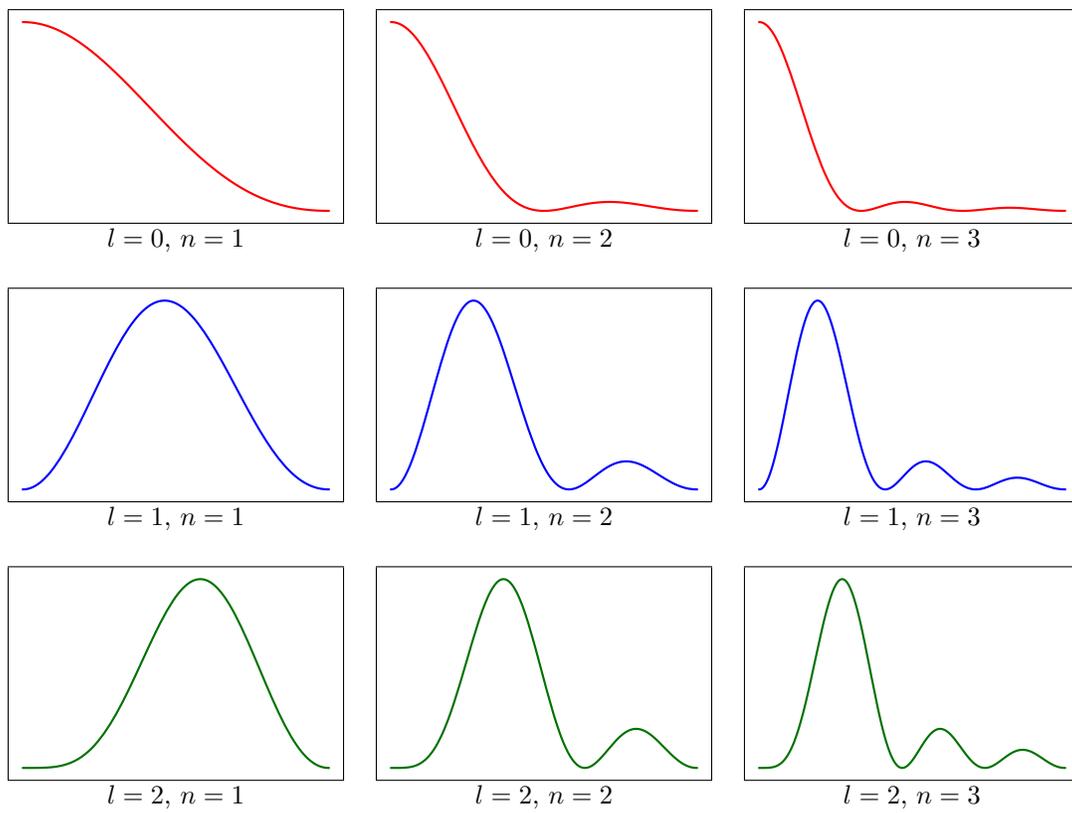


FIGURE 1 – *Module carré* des fonctions de Bessel sphériques.