Autour du spin - Samuel - Benjamin

July 30, 2020

1 Aspects classiques du moment cinétique - Benjamin

En mécanique classique, on définit la quantité moment cinétique comme $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$ avec $\vec{p} = m\vec{v}$ l'impulsion et $\vec{r}$ le vecteur position. Cette quantité donne une info sur la rotation des objets autour d'un point (c'est une quantité qui dépend de l'origine du repère). Cela permet de rendre compte de la rotation d'objets autour de leur centre de masse. En effet on a des cas tels que le PFD donne $\sum \vec{F} = 0$ et donc pas d'accélération mais pour autant il y a une rotation de l'objet (penser à une sphère que l'on "cisaille" à chaque extrémité). Le théorème du moment cinétique donne

$$\frac{d}{dt}\vec{L} = \underbrace{\sum_i \vec{r} \wedge \vec{F}_i}_{\text{couple}} \tag{1}$$

Cette équation est l'analogue pour la vitesse de rotation du PFD pour la vitesse (on a $\vec{L} = I\vec{\Omega}$ avec $\vec{\Omega}$ le vecteur rotation et I la matrice d'inertie qui rend compte de la géométrie et de répartition de la masse du solide).

Un modèle classique de l'électron de masse m_e tournant autour du noyau en décrivant un cercle de rayon R à la vitesse $v_e = R\Omega$ a un moment cinétique

$$\vec{L} = mv_e r\vec{u}_z = m_e\Omega r^2\vec{u}_z \tag{2}$$

avec $\vec{u}_z$ orthogonal au plan contenant la trajectoire de l'électron. Par ailleurs l'électron a aussi une charge donc il crée un courant I.

En physique classique, le moment magnétique est défini comme le vecteur $\vec{\mu}$ tel que le couple exercé par un champ $\vec{B}$ est

$$\vec{\Gamma} = \vec{\mu} \wedge \vec{B} \tag{3}$$

Dans le cas d'un fil fermé sur lui-même enserrant une surface S et parcouru par une intensité I, on montre que les forces de Laplace s'exerçant sur le fil génèrent un couple $\vec{\mu} \wedge \vec{B}$ avec

$$\vec{\mu} = IS\vec{u}_z \tag{4}$$

où $\vec{u}_z$ est orthogonal à la surface S. Le couple s'annule lorsque le flux du champ $\vec{B}$ à travers le circuit est maximal, le moment magnétique tend à s'aligner avec le champ.

Dans le cas de l'électron le courant est $I = \frac{dq}{dt} = \frac{-q\Omega}{2\pi}$ et $S = \pi r^2$ donc

$$\vec{\mu} = \frac{-q\Omega R^2}{2}\vec{u}_z = \frac{-q}{2m_e}\vec{L} = \gamma_0\vec{L} \tag{5}$$

et donc le TMC s'écrit

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma\vec{B} \wedge \vec{\mu} \tag{6}$$

On a une équation de precession du moment magnétique autour de $\vec{B}$ et non pas un alignement.

1.1 Samuel - Levitron

Énergie de la toupie :

$$E = mgz - \vec{\mu}.\vec{B}(\vec{r}) \tag{7}$$

$\vec{\mu}$ et $\vec{B}$ anti alignés. (hypothèse que la toupie est bien verticale)

condition pour avoir un minimum verticalement :

$$\frac{\partial E}{\partial z} = 0 \tag{8}$$

stabilité :

$$\mu\frac{\partial^2}{\partial^2 x_i}B > 0 \tag{9}$$

Impossible car $\Delta B = 0$

Hypothèses $\Omega_{\text{spin}} \gg \Omega_{\text{precession}}$, $\Omega_{\text{precession}} \gg \Omega_{\text{lateral}}$. On peut faire l'approx que le champ est toujours aligné avec l'axe de la toupie.

$$E = mgz - \mu|B| \tag{10}$$

Dans ce cas on peut trouver une configuration stable.

1.2 Stern-Gerlach classique

Une source émet des particules avec un moment magnétiques. On les fait passer dans un champ magnétique orienté selon e_z.

$$E = -\vec{\mu}.\vec{B} \tag{11}$$

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}E = \vec{\nabla}(\vec{\mu}.\vec{B}) \tag{12}$$

$$F_z = \mu_z\partial_z B_z \tag{13}$$

On suppose le champ $\vec{B}$ selon $\vec{u}_z$ avec $B_z = B_0 + b'z$ (formellement ce n'est pas à divergence nulle mais on peut montrer que cela fonctionne "comme si"). On a alors

$$\frac{d\mu_z}{dt} = 0 \tag{14}$$

$$F_z = \mu_z b' \tag{15}$$

Le moment magnétique selon z est conservé au cours de l'expérience. Si $\vec{\mu}$ était une variable continue on devrait voir un nuage de points suivant la répartition statistique initiale du moment magnétique.

Expérimentalement, ça n'est pas ce qui se passe, il y a des taches réparties de façon discrète.

Analyse dimensionnelle : $\mu \propto \frac{\hbar q}{m}$. Les résultats expérimentaux pour 2 tâches sont compatibles avec $\mu_0 = \frac{\hbar q}{2m}$

On cherche à expliquer les expériences à 2 tâches. Hypothèse minimale : on est sur un espace de Hilbert de dimension 2. On introduit l'opérateur $\hat{\mu}_z$ l'observable moment magnétique selon $\vec{u}_z$. Ses valeurs propres sont $\pm\mu_0$, on note $|\pm\rangle_z$ les vecteurs propres associés. Dans cette base

$$\hat{\mu}_z = \mu_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{16}$$

Expérimentalement, on constate que si on conserve uniquement les particules déviées vers le haut (dans l'état $|+\rangle_z$) et qu'on les passe dans un appareil de Stern-Gerlach d'axe x, on observe 2 tâches avec le même nombre de particules. En terme de quantique on interprète ce résultat comme des probas égales de mesurer $\pm\mu_0$ selon x et donc (postulat de la mesure)

$$|_z\langle +|+\rangle_x|^2 = |_z\langle -|+\rangle_x|^2 \tag{17}$$

En écrivant $\hat{\mu}_x = \mu_0|+\rangle_{xx}\langle +| - \mu_0|-\rangle_{xx}\langle -|$ on trouve en utilisant la relation précédente

$$_z\langle +|\, \mu_x \,|+\rangle_z = 0 \tag{18}$$

Par ailleurs $\mathrm{tr}(\hat{\mu}_x) = 0$ (somme valeurs propres $= 0$) donc les élements diagonaux sont nuls. L'opérateur est hermitien et de déterminant $-\mu_0^2$ donc

$$\hat{\mu}_x = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi_x} \\ e^{i\phi_x} & 0 \end{pmatrix} \tag{19}$$

L'opérateur $\hat{\mu_y}$ est de la même forme. Enfin comme précédement

$$\langle +|_x\, \mu_y \,|+\rangle_x = 0 \tag{20}$$

implique que

$$\cos(\phi_x - \phi_y) = 0 \tag{21}$$

et donc $\phi_x - \phi_y = \pi/2$. On ne peut pas faire mieux car tout est déini à une phase près.

On choisit donc

$$\hat{\mu}_x = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{22}$$

$$\hat{\mu}_y = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{23}$$

pour un angle θ arbitraire entre x et z on aimerait que le moment magnétique mesuré classiquement soit $\mu_\theta = \cos\theta \mu_z + \sin\theta \mu_x$. En appliquant le principe de correspondance on pose l'opérateur

$$\hat{\mu}_\theta = \mu_0 \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{24}$$

Ses valeurs propres sont

$$|+\rangle_\theta = \cos(\theta/2)\,|+\rangle_z + \sin(\theta/2)\,|-\rangle_z \tag{25}$$

$$|-\rangle_\theta = -\sin(\theta/2)\,|+\rangle_z + \cos(\theta/2)\,|-\rangle_z \tag{26}$$

L'obervable μ_θ est invariante par $\theta \to \theta + 2\pi$ et le vecteur $< \vec{\mu} >$ se transforme bien selon les rotations usuelles de $\mathbb{R}^3$. En revanche les vecteurs propres ne sont pas invariants par cette transformation puisqu'ils récupèrent un signe -.

2 Lien entre moment cinétique et rotation - SO(3)

2.1 Moment cinétique en MQ

En mécanique quantique l'opérateur moment cinétique orbital est défini comme

$$\hat{L} = \hat{r} \wedge \hat{p} = \begin{pmatrix} \hat{y}\hat{p_z} - \hat{z}\hat{p_y} \\ \hat{z}\hat{p_x} - \hat{x}\hat{p_z} \\ \hat{x}\hat{p_y} - \hat{y}\hat{p_x} \end{pmatrix} \tag{27}$$

En utilisant les relations de commutation canoniques $[\hat{x_i}, \hat{p_j}] = i\hbar\delta_{ij}$ on obtient les relations de commutation

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \tag{28}$$

où ϵ_{ijk} est le tenseur antisymétrique (=0 sauf si i, j, k sont différents 2 à 2, dans ce cas il vaut la signature de la permutation (i, j, k)). On définit alors un moment cinétique comme un ensemble de 3 observables vérifiant ces relations de commutation. En particulier un moment cinétique orbital est un moment cinétique.

Ces relations de commutation contraignent les valeurs propres des opérateurs $\hat{L}_i$. On montre que $\hat{L}^2 = \sum_i \hat{L}_i^2$ commute avec chacun des $\hat{L}_i$. On peut former une base propre à partir des observables $\{\hat{L}^2, \hat{L}_z\}$. On indexera les vecteurs de cette base par deux nombres $\{j, m\}$. On peut alors montrer que ces nombres vérifient

1. $j \in \mathbb{N}/2$ cad j est entier ou demi-entier
2. Pour j fixé, m prend les valeurs $\{-j, -j+1, ..., j-1, j\}$
3. $J^2|j,m\rangle = \hbar j(j+1)|j,m\rangle$
4. $J_z|j,m\rangle = \hbar m|j,m\rangle$

Dans le cas du moment cinétique orbital on a $\hat{L_z} = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x)$ qui s'écrit en coordonée sphériques $\hat{L_z} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$. Une fonction propre $\psi_m(r,\theta,\phi)$ associée à m vérifie donc $-i\hbar\frac{\partial\psi_m}{\partial\phi} = \hbar m\psi_m$ qui s'intègre en $\psi_m = \Phi(r,\theta)e^{im\phi}$. Pour que la fonction d'onde soit bien définie il faut donc que $m \in \mathbb{N}$ et donc également $j \in \mathbb{N}$.

Comme dans le cas classique, on suppose qu'à chaque moment cinétique $\hat{L}$ on peut associer un moment magnétique $\hat{\mu}$ qui lui est proportionnel

$$\hat{\vec{\mu}} = \gamma\hat{\vec{L}} \tag{29}$$

et l'Hamiltonien associé est comme en classique $\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}}.\vec{B}$. Si il n'existait que des moments cinétiques orbitaux correspondant à j entier, l'expérience de Stern et Gerlach devrait toujours donner un nombre impair de tâches (le moment J_z prend $2j+1$ valeurs). On sait que ce n'est pas le cas donc il existe des moments cinétiques non orbitaux (spin).

2.2 Le groupe SO(3)

On définit le groupe SO(3) comme le groupe des rotations dans $\mathbb{R}^3$ (c'est un groupe pour la composition : l'identité est une rotation, la composition de 2 rotations est une rotation, l'inverse d'une rotation est une rotation d'angle opposé). Une rotation d'axe $\vec{z}$ d'angle θ s'écrit

$$R_{\vec{z}}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{30}$$

On peut mettre cette matrice sous forme exponentielle. Une rotation d'angle θ fixé est une rotation d'angle θ/N appliquée N fois. Si N est assez grand on a donc

$$R_{\vec{z}}(\theta) = \left(1 + i\frac{\theta}{N}J_z + O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right)^N \xrightarrow[N+\infty]{} e^{i\theta J_z} \tag{31}$$

avec J_z la matrice

$$J_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{32}$$

On dit que J_z est un générateur des rotations autour de $\vec{z}$. De même on peut définir les matrices J_x et J_y génératrices des rotations autour de $\vec{x}$ et $\vec{y}$ comme

$$J_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} J_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{33}$$

et qui exponentiées contre un angle θ donnent les rotations selon $\vec{x}$ et $\vec{y}$ d'angle θ. Dans le cas général, une rotation d'angle θ autour d'un vecteur unitaire $\vec{n}$ s'écrit

$$R_{\vec{n}}(\theta) = e^{i\theta(n_x J_x + n_y J_y + n_z J_z)} = e^{i\theta \vec{n}.\vec{J}} \tag{34}$$

Les matrices J_i ne commutent pas et on ne peut pas séparer les termes de l'exponentielle. On montre en effet que

$$[J_i, J_k] = i\epsilon_{ijk} J_k \tag{35}$$

Les générateurs des rotations dans $\mathbb{R}^3$ sont donc des moments cinétiques (tout comme l'impulsion est le générateur des translations). L'ensemble de ces 3 matrices s'appelle l'algèbre de Lie de SO(3) et est notée so(3). A partir de so(3) on peut engendrer tout le groupe SO(3) via l'exponentielle.

On repart de l'expression $R_{\vec{n}}(\psi) = e^{i\psi\vec{n}.\vec{J}}$. Le vecteur $\vec{n}$ est un vecteur unitaire de la sphère et dépend donc de deux coordonnées $(\theta, \phi) \in [0, \pi] \times [0, 2\pi]$. On pourrait penser que $\psi \in [0, 2\pi]$ mais ce n'est pas le cas car une rotation d'un angle $\psi + \pi$ autour d'un axe $\vec{n}$ est également une rotation d'axe $\pi - \psi$ autour de l'axe $-\vec{n}$ (faire un dessin en 2D). Formellement on a $R_{\vec{n}}(\pi + \psi) = R_{-\vec{n}}(\pi - \psi)$ et donc quitte à changer $\vec{n}$ en son opposé on peut prendre $\psi \in [0, \pi]$. Le groupe $SO(3)$ est donc paramétré par 3 coordonées $(\psi, \theta, \phi) \in [0, \pi] \times [0, \pi] \times [0, 2\pi]$. On peut voir cet espace comme une boule de rayon π. La coordonnée ψ est la coordonnée habituellement notée r en sphérique et les deux autres sont les angles sphériques. Une rotation de $SO(3)$ est donc représentée par un vecteur $\vec{t}$ de cette boule de rayon π. La direction de $\vec{t}$ donne l'axe autour duquel la rotation se fait tandis que sa norme donne la valeur de l'angle de rotation.

Au bord de la boule (rotations d'angle π) les points antipodaux s'identifient (on a $R_{\vec{n}}(\pi) = R_{-\vec{n}}(\pi)$). On peut donc tracer des chemins fermés (départ et arrivée au même point) qui ne se réduisent pas continûement au chemin nul : on peut tracer des chemins qui traversent la boule. Le groupe d'homotopie de SO(3) n'est pas trivial.

2.3 Représentations de SO(3)

Pour un groupe G, on peut définir une représentation de groupe. Soit V un espace vectoriel et GL(V) les endomorphismes inversibles sur V. Une représentation du groupe G sur V est une application $T : G \longrightarrow GL(V)$ qui respecte la loi de groupe, c'est à dire $T(e) = Id$ (le neutre est envoyé sur l'identité) et $T(g_1 g_2) = T(g_1)T(g_2)$ (le produit à droite est au sens de la composition).

Si l'espace vectoriel V est de dimension finie, l'espace GL(V) s'identifie à l'espace des matrices inversibles. L'application T associe à chaque élément g du groupe une matrice $T(g)$ et le produit de 2 matrices respecte la loi de groupe.

Si G est l'ensemble des réels muni de la loi + cad $G = (\mathbb{R}, +)$ et que l'espace vectoriel $V = \mathbb{R}^2$, on cherche une application $T : G \longrightarrow GL_2(\mathbb{R})$. Autrement dit on cherche une application T qui à chaque réel x associe une matrices $T(x)$ réelle 2×2 inversible. Les matrices T doivent vérifier $T(x + y) = T(x)T(y)$. Si on pose

$$T(x) = \begin{pmatrix} 1 & x \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{36}$$

alors on vérifie que $T(x)T(y) = T(x+y)$. On a donc trouvé une représentation du groupe $(\mathbb{R},+)$ sur $V = \mathbb{R}^2$.

On cherche des repésentations de notre groupe $SO(3)$ sur des espaces V de dimension différente. Une manière de faire est de commencer par trouver des représentants de l'aglèbre de Lie et les passer à l'exponentielle pour représenter SO(3) tout entier.

dim V = 1 On cherche à représenter so(3) : on cherche 3 matrices 1×1 vérifiant les relations de commutation. Comme toutes les matrices de taille 1 commutent on trouve $J_x = J_y = J_z = 0$. Une représentation de SO(3) peut être obtenue en passant ces matrices à l'exponentielle et on trouve donc $T(g) = 1$. Cette représentation est la représentation trivialle.

dim V = 3 On peut faire agir SO(3) sur un espace de dimension 3 : $\forall M \in SO(3)$ on a $T(M) = M$. Formellement la matrice M à droite vit dans l'espace $GL_3(\mathbb{R})$ tandis que celle en argument de T vit dans $SO(3)$.

dim V = 2 On se place sur $V = \mathbb{C}^2$ de dimension 2 sur $\mathbb{C}$. Les 3 matrices vérifiant les relations de commutation sont les matrices de Pauli $\{\frac{\sigma_x}{2}, \frac{\sigma_y}{2}, \frac{\sigma_z}{2}\}$. On a donc une représentation de SO(3) (vu comme la boule de rayon π $(\psi, \vec{n})$ de $\mathbb{R}^3$) sous la forme

$$T((\psi, \vec{n})) = U_{\vec{n}}(\psi) = e^{i\psi\vec{n}.\vec{\sigma}/2} = \cos\frac{\psi}{2} + i\sin\frac{\psi}{2}\vec{n}.\vec{\sigma} \tag{37}$$

On reconnait les matrices de $SU(2)$ mais elles ne sont pas toutes engendrées : en effet on a $\psi \in [0,\pi]$ et on ne génère donc que la moitié de $SU(2)$. Pour générer toutes les matrices de $SU(2)$ il faudrait $\psi \in [0, 2\pi]$. A chaque élément de SO(3) on peut associer 2 éléments de SU(2). En effet si $\psi \to \psi + 2\pi$ alors on a le même élément de $SO(3)$ mais $U_{\vec{n}}(\psi) \to -U_{\vec{n}}(\psi)$. A chaque élément de SO(3) on peut donc associer 2 matrices $\pm U$. Dans ce cas, on génère bien tout le groupe $SU(2)$.

Si on prend $g = R_{\vec{n}}(\pi)$ alors $g^2 = e$ (élément neutre) mais $T(g^2) = T(g)T(g) = U_{\vec{n}}(\pi)^2 = -Id \neq T(Id) = Id$. La relation $T(g_1g_2) = T(g_1)T(g_2)$ est vérifiée à une phase près : $T(g_1g_2) = e^{i\phi(g_1,g_2)}T(g_1)T(g_2)$. La représentation est dite projective. Les vecteurs de V se tranforment pour $g \in SO(3)$ comme $T(g)v = e^{i\psi\vec{n}.\vec{\sigma}/2}v$. Il faut donc appliquer une rotation de 4π pour réobtenir v et une rotation de 2π donne $v \to -v$.