Chapitre 10

Spin 1/2

Une particule possède des degrés de liberté externes, comme la position, et l'impulsion. Ces degrés de liberté sont présents aussi bien en physique classique que quantique. Dans la première partie du cours, nous avons vu comment traiter ces degrés de liberté en physique quantique. Dans ce chapitre nous allons étudier les observations expérimentales qui ont mené à la découverte d'un degré de liberté interne des particules, sans équivalent classique : le spin. L'hypothèse de l'existence de ce dégré de liberté a été émise par Goudsmit et Ulhenbeck en 1925. De la même manière que pour les degrés de libertés externes, il s'agit d'une observable. Dans ce chapitre, nous allons construire cette observable à partir des résultats de l'expérience historique de Stern & Gerlach (1922), qui est un appareil capable de la mesurer. Pour bien aborder ce chapitre, il faut maîtriser le chapitre précédent sur les systèmes à deux niveaux, et bien connaître la magnétostatique, en particulier le théorème du moment cinétique, ainsi que la notion de dipôle magnétique (spire ou aimant) et son interaction avec un champ magnétique.

10.1Modèle classique du moment magnétique atomique

Moment magnétique et moment cinétique orbital : Dans le modèle classique de l'atome, un électron de masse m et de charge q est en mouvement circulaire et uniforme autour du noyau. Le mo-

ment cinétique orbital de l'électron est



où \vec{u} est le vecteur unitaire orthogonal au plan de la trajectoire de l'électron (cf. figure ci-contre). L'électron en rotation autour du noyau peut être vu comme une spire de courant. Or une spire de courant est un moment magnétique, dont le module est proportionnel au courant i et à la surface de la spire

$$\vec{\mu} = iS\vec{u} = \frac{qv}{2\pi r}\pi r^2\vec{u} = \frac{qrv}{2}\vec{u}.$$

On constate que dans ce modèle, $\vec{\mu} = \gamma_0 \vec{L}$, avec $\gamma_0 = \frac{q}{2m}$: Le moment cinétique orbital est proportionnel au moment magnétique. Le coefficient de proportionnalité, γ_0 , se nomme facteur gyromagnétique de l'électron.

 $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} = rmv\vec{u}.$

Dynamique en champ magnétique uniforme : Si l'on plonge l'atome dans un champ magnétique uniforme, il ne subit pas de force mais un couple $\vec{\Gamma} = \vec{\mu} \wedge \vec{B}$. La dynamique est donnée par le théorème du moment cinétique

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\mu} \wedge \vec{B}.$$

Supposons de $\vec{B} = B\vec{u}_z$, et substituons $\vec{L} = \vec{\mu}/\gamma_0$. On obtient

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \gamma_0 \vec{\mu} \wedge \vec{B} = -\gamma_0 B \vec{u}_z \wedge \vec{\mu} = \omega_0 \vec{u}_z \wedge \vec{\mu},$$

où l'on a introduit la fréquence de Larmor $\omega_0 = -\gamma_0 B$. En projetant cette équation sur l'axe O_z , on obtient $\frac{d\mu_z}{dt} = 0$, donc $\mu_z =$ cte. En projetant sur les axes O_x et O_y , on trouve deux équations différentielles

$$\dot{\mu_x} = -\omega_0 \mu_y \qquad \mu_x(t) = \mu_\perp \cos\left(\omega_0 t + \phi\right)$$

$$\dot{\mu_y} = \omega_0 \mu_x \qquad \mu_y(t) = \mu_\perp \sin\left(\omega_0 t + \phi\right).$$

couplées que l'on sait résoudre. Comme la projection de $\vec{\mu}$ sur l'axe O_z est constante, il en est de même de la norme μ_{\perp} de sa projection dans le plan $_xO_y$. La solution dans le plan $_xO_y$ est l'équation paramétrique d'un cercle. On obtient donc un mouvement de précession autour de l'axe O_z , à la fréquence de Larmor.



10.2 Expérience de Stern & Gerlach (1922)

Description de l'expérience historique : Nous allons maintenant modéliser l'expérience de Stern et Gerlach (S&G), qui a mené à l'introduction du spin. Dans cette expérience on cherche à mesurer μ_z , la projection suivant l'axe vertical O_z du moment magnétique d'atomes d'argent. Ces atomes sortent d'un four par un petit trou, sous forme d'un jet gazeux. Ce jet est mis en forme par la fente représentée en bas à gauche de l'image ci-contre, extraite de l'article original. Le faisceaux d'atomes passe ensuite dans l'entrefer d'un aimant, dont les pôles sont asymétriques, de telle sorte qu'il existe un fort gradient de champ magnétique suivant l'axe O_z . On s'attend donc à ce que les atomes soient plus ou moins déviés vers les z positifs ou négatifs, par la force magnétique $\vec{F} = \overline{\text{grad}}(\vec{\mu}.\vec{B}) = \mu_z \partial_z B_z.$





Notez d'abord que l'orientation des dipôles magnétiques à la sortie du four est quelconque, et que la probabilité pour chaque orientation est la même. En l'absence de gradient de champ magnétique, on s'attend au résultat de la figure (a) ci-contre : les atomes continuent tout droit, et viennent former une tâche centrée en z = 0 sur un écran situé de l'autre côté de l'entrefer. En présence

du gradient du champ magnétique, on s'attendrait à voir la tâche de la figure (b) sur l'écran : les atomes étant plus ou moins déviés suivant l'orientation de leur moment magnétique à la sortie du four. Le haut (resp. le bas) de la tâche correspond aux atomes qui ont leur moment magnétique anti-aligné (resp. aligné) avec le gradient de champ magnétique, et le centre de la tâche correspondant aux atomes qui ont leur moment magnétique orthogonal au gradient de champ magnétique. Lorsque l'on fait cette expérience, on obtient en fait la figure (c) : il n'y a que deux tâches sur l'écran, comme si la projection du moment magnétique suivant O_z ne pouvait prendre que deux valeurs. Le faisceau d'atomes a été divisé en deux parts égales, l'une déviée vers le haut, l'autre vers le bas. La description classique ne fonctionne pas : la projection du moment magnétique suivant l'axe du gradient du champ magnétique est quantifiée, elle ne peut prendre que les valeurs $\pm \mu_0$.

Modélisation d'un S&G : pour décrire les résultats de cette expérience, on introduit l'observable ¹ projection du moment magnétique suivant l'axe O_z . On la note $\hat{\mu}_z$. D'après l'expérience, cette observable a deux valeurs propres $\pm \mu_0$, auxquelles on peut associer deux états propres $|\pm\rangle_z$, correspondant à

^{1.} Un peu comme on avait introduit l'observable orientation dans le chapitre précédent.

l'état des atomes des faisceaux supérieur et inférieur, respectivement. L'espace des états associé à cette observable est de dimension 2 : les deux vecteurs propres $|\pm\rangle_z$ forment une base orthonormée de cet espace que l'on notera \mathcal{B}_z . Notez que si l'expérimentateur avait choisi d'orienter le S&G suivant O_x ou O_y , au lieu de O_z , on aurait fait exactement la même modélisation : on aurait alors introduit les observables $\hat{\mu}_x$ et $\hat{\mu}_y$. Le résultat de l'expérience ne dépend pas du nom choisit pour les axes, donc ces deux observables ont également pour valeurs propres $\pm \mu_0$. On note les vecteurs propres associés $|\pm\rangle_x$ dans le cas de $\hat{\mu}_x$, et $|\pm\rangle_y$ dans le cas de $\hat{\mu}_y$. Ces ensembles de vecteurs propres forment des bases orthonormées de l'espace des états que nous noterons \mathcal{B}_x et \mathcal{B}_y . On a donc²

$$\hat{\mu}_{z} |\pm\rangle_{z} = \pm \mu_{0} |\pm\rangle_{z} \qquad \qquad \hat{\mu}_{x} |\pm\rangle_{x} = \pm \mu_{0} |\pm\rangle_{x} \qquad \qquad \hat{\mu}_{y} |\pm\rangle_{y} = \pm \mu_{0} |\pm\rangle_{y}$$

$$(\hat{\mu}_{z})_{\mathcal{B}_{z}} = \mu_{0} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \qquad (\hat{\mu}_{x})_{\mathcal{B}_{x}} = \mu_{0} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \qquad (\hat{\mu}_{y})_{\mathcal{B}_{y}} = \mu_{0} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Si l'on positionne un écran derrière l'aimant, l'appareil de S&G se comporte comme un appareil de mesure d'une composante du moment magnétique atomique³. Si l'on ne positionne pas d'écran derrière l'aimant, l'appareil de S&G permet de préparer un faisceau d'atomes dans les états $|\pm\rangle_z$. Les atomes dans l'état $|+\rangle_z$ se trouvent dans le faisceau dévié vers le haut, les atomes dans l'état $|-\rangle_z$ se trouvent dans le faisceau dévié vers le haut, les atomes dans l'état $|-\rangle_z$ se trouvent dans le faisceau dévié vers le bas⁴.

Cascade de deux S&G alignés : Supposons que l'on cascade deux S&G orientés suivant l'axe O_z . Si l'on bloque le faisceau dévié vers le bas par le premier S&G avec un cache (atomes dans l'état $|-\rangle_z$), qu'arrive-t-il au faisceau d'atomes dans l'état $|+\rangle_z$ traversant le second S&G? Si l'on a confiance dans la modélisation que l'on vient de faire, il devrait être dévié un peu plus vers le haut, et l'on devrait observer une unique tâche sur l'écran du côté des z positifs. En effet, l'état des atomes en entrée de l'appareil de mesure est un état propre de l'observable qui lui est associé. L'appareil de mesure ne modifie donc pas cet état, et donne la même valeur pour chaque atome (μ_0 dans ce cas). En pratique c'est effectivement ce que l'on observe. Dans ce qui suit, tracez vous-même les tâches obtenues sur l'écran lors de chaque expérience.





Cascade de deux S&G tournés de $\pi/2$: Supposons qu'à la sortie du premier S&G orienté suivant O_z , comme précédemment, on sélectionne le faisceau supérieur (atomes dans $|+\rangle_z$), et on le fait passer dans un S&G orienté suivant l'axe O_x . Qu'observe-t-on sur l'écran? Si l'on fait l'expérience, on observe deux tâches d'égales intensités sur l'axe O_x de part et d'autre de l'origine. Dans la suite nous allons utiliser ce résultat expérimental pour trouver l'expression de la matrice de l'observable $\hat{\mu}_x$ dans la base des états propres de $\hat{\mu}_z$ (base \mathcal{B}_z). Que sait-on *a priori* de cette matrice?

— $\hat{\mu}_x$ est une observable, donc la matrice dans n'importe quelle base est hermitienne. En particulier dans la base \mathcal{B}_z , $(\hat{\mu}_x)_{\mathcal{B}_z} = \mu_0 \begin{pmatrix} \alpha_x & \beta_x^* \\ \beta_x & \gamma_x \end{pmatrix}$, avec $(\alpha_x, \gamma_x) \in \mathbb{R}^2$, et $\beta_x \in \mathbb{C}$

^{2.} Chacune de ces matrices décrit un appareil de S&G dirigé suivant un certain axe.

^{3.} En pratique, les états sont détruits par l'interaction des atomes avec l'écran.

^{4.} À la différence du quadrupôle électrostatique utilisé dans le chapitre précédent, on peut préparer les deux états propres. Dans le cas de la molécule d'ammoniac, les molécules dans l'état $|\psi_S\rangle$ étaient perdues.

— $\hat{\mu}_x$ a deux valeurs propres $\pm \mu_0$. Or on connaît deux caractéristiques d'une matrice qui sont invariantes par changement de base : la trace et le déterminant. Calculons la trace et le déterminant dans la base \mathcal{B}_x : $\operatorname{Tr}(\hat{\mu}_x) = \mu_0 - \mu_0 = 0$, et $\det(\hat{\mu}_x) = \mu_0 \times (-\mu_0) = -\mu_0^2$. En utilisant leur expression dans la base \mathcal{B}_z : $\operatorname{Tr}(\hat{\mu}_x) = \alpha_x + \gamma_x$ et $\det(\hat{\mu}_x) = \mu_0^2(\alpha_x\gamma_x - |\beta_x|^2)$, on obtient le système d'équations

$$\alpha_x + \gamma_x = 0 \tag{10.1}$$

$$\alpha_x \gamma_x - |\beta_x|^2 = -1 \tag{10.2}$$

— Juste avant le second S&G, les atomes sont dans l'état $|+\rangle_z$. Comme on observe deux tâches identiques en sortie du second S&G, cela signifie que la probabilité p = 1/2 d'être projeté dans $|+\rangle_x$ ou $|-\rangle_x$ est la même. La valeur moyenne de $\hat{\mu}_x$ sur l'état $|+\rangle_z$ est donc

$$_{z}\langle +|\hat{\mu}_{x}|+\rangle_{z} = p\mu_{0} + p(-\mu_{0}) = 0.$$

Or, cette valeur moyenne est aussi un élément de matrice de $\hat{\mu}_x$ dans la base \mathcal{B}_z . Il s'agit du coefficient $\mu_0 \alpha_x$. On a donc $\alpha_x = 0$ et l'on déduit de l'équation 10.1 que $\gamma_x = 0$. L'équation 10.2 donne alors $|\beta_x|^2 = 1$. β_x est un nombre complexe de module unité, que l'on peut écrire $\beta_x = e^{i\phi_x}$, où la phase ϕ_x reste à déterminer. Notez qu'on aurait pu faire le même raisonnement avec un S&G suivant O_y , moyennant l'introduction d'une phase ϕ_y . Le résultat de l'expérience nous donne donc les expressions des matrices de $\hat{\mu}_x$ et $\hat{\mu}_y$ dans la base \mathcal{B}_z :

$$(\hat{\mu}_x)_{\mathcal{B}_z} = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & e^{-\mathrm{i}\phi_x} \\ e^{\mathrm{i}\phi_x} & 0 \end{pmatrix} \qquad \qquad (\hat{\mu}_y)_{\mathcal{B}_z} = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & e^{-\mathrm{i}\phi_y} \\ e^{\mathrm{i}\phi_y} & 0 \end{pmatrix}.$$

— Dans la suite, nous allons avoir besoin d'exprimer les états propres de $\hat{\mu}_x$ et $\hat{\mu}_y$ dans la base \mathcal{B}_z . Pour obtenir ces expressions, il suffit de diagonaliser les matrices ci-dessus. Nous connaissons déjà les valeurs propres : $\pm \mu_0$. Les vecteurs propres de $\hat{\mu}_{x,y}$ s'obtiennent en résolvant l'équation aux valeurs propres

$$e^{-\mathrm{i}\phi_{x,y}}v = \pm u$$
$$e^{\mathrm{i}\phi_{x,y}}u = \pm v,$$

En fixant u = 1, on obtient $v = \pm e^{i\phi_{x,y}}$. Les kets propres de $\hat{\mu}_{x,y}$, sont donc

$$\left|\pm\right\rangle_{x,y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left|+\right\rangle_{z} \pm e^{\mathrm{i}\phi_{x,y}}\left|-\right\rangle_{z}\right)$$

associés aux valeurs propres $\pm \mu_0$, respectivement.

— Afin de caractériser totalement les matrices de $\hat{\mu}_{x,y}$ dans la base \mathcal{B}_z , il faut déterminer ϕ_x et ϕ_y . Supposons que l'on mesure la valeur moyenne de $\hat{\mu}_y$ sur l'état $|+\rangle_x$. Cette situation correspond à une cascade de S&G, le premier, orienté suivant O_x , produisant un faisceau d'atomes dans l'état $|+\rangle_x$ (on bloque le faisceau d'atomes dans l'état $|-\rangle_x$). Le second étant orienté suivant O_y . La situation étant parfaitement analogue au cas précédent, on sait que l'on va observer deux tâches d'égales intensités sur l'axe O_y . On a donc

$$_{x}\langle +|\hat{\mu}_{y}|+\rangle_{x}=0$$

soit

$$\begin{pmatrix} 1 & e^{-\mathrm{i}\phi_x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & e^{-\mathrm{i}\phi_y} \\ e^{\mathrm{i}\phi_y} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{\mathrm{i}\phi_x} \end{pmatrix} = e^{\mathrm{i}(\phi_x - \phi_y)} + e^{-\mathrm{i}(\phi_x - \phi_y)} = 0.$$

On obtient donc $\cos(\phi_y - \phi_x) = 0$, soit $\phi_y - \phi_x = \frac{\pi}{2}[\pi]$. Comme les états sont définis à une phase globale près, on peut prendre $\phi_x = 0$ et $\phi_y = \frac{\pi}{2}$ sans perdre en généralité : seule la différence de phase $\phi_y - \phi_x$ est fixée. Finalement, dans la base \mathcal{B}_z , on a⁵

^{5.} On reconnaît des matrices bien connues : la première et la dernière sont les matrices de l'observable orientation introduite au chapitre précédent, dans les bases \mathcal{B}_{c} et \mathcal{B}_{nc} , respectivement.

$$(\hat{\mu}_x)_{\mathcal{B}_z} = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \qquad (\hat{\mu}_y)_{\mathcal{B}_z} = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{i}\\ \mathbf{i} & 0 \end{pmatrix} \qquad \qquad (\hat{\mu}_z)_{\mathcal{B}_z} = \mu_0 \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Commutateur entre composantes du moment magnétique : L'expérience de S&G suggère que les composantes du moment magnétique ne commutent pas entre elles. En effet, dans le cas d'une cascade de 2 S&G tournés de $\pi/2$, comme sur la figure précédente, on constate que l'état propre $|+\rangle_z$ de l'observable $\hat{\mu}_z$ n'est pas un état propre de $\hat{\mu}_x$. Si c'était le cas, on observerait seulement une tâche sur l'écran, or on observe deux tâches. Cela impose que les observables associées au deux appareils de mesure ne commutent pas. En effet, elles ne sont pas diagonalisables dans une même base. Vous pouvez vérifier chez vous que ce modèle décrit bien ce comportement, en calculant le commutateur des composantes du moment magnétique à l'aide des matrices obtenues ci-dessus. Vous allez obtenir ⁶ :

$$[\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y] = 2i\mu_0 \hat{\mu}_z \qquad \qquad [\hat{\mu}_y, \hat{\mu}_z] = 2i\mu_0 \hat{\mu}_x \qquad \qquad [\hat{\mu}_z, \hat{\mu}_x] = 2i\mu_0 \hat{\mu}_y$$

Ces relations signifient que l'on ne peut pas connaître simultanément deux composantes du moment magnétique.

Cascade de 3 S&G : Pour conclure sur les cascades de S&G, regardons ce qui se passe si l'on ajoute un troisième S&G, aligné suivant l'axe O_z . Si l'on cache le faisceau d'atomes dans l'état $|-\rangle_x$ à la sortie du second S&G, qu'obtient-on sur l'écran? On observe deux tâche, de part et d'autre de l'origine⁷, sur l'axe O_z . En effet, la situation des second et troisième S&G est parfaitement analogue à la situation traitée dans le paragraphe précédent : il suffit d'intervertir le nom des axes O_x et O_z , ou alors, ce qui revient au même, de tourner l'ensemble d'un angle $\pi/2$.



10.3 Quantification du moment cinétique orbital

Dans la section 10.1, nous avons vu que dans le modèle atomique classique, le moment cinétique orbital est proportionnel au moment magnétique. Il est donc naturel de se demander si la quantification du moment magnétique observée dans l'expérience de S&G est liée à la quantification du moment cinétique orbital. En d'autres termes, est-ce que l'on peut quantifier le moment cinétique orbital, et trouver des valeurs propres compatibles avec les résultats de S&G. Dans la suite nous allons donc introduire l'opérateur moment cinétique orbital et chercher ses valeurs propres.

Expression de l'opérateur projection du moment cinétique suivant l'axe O_z : L'opérateur moment cinétique orbital est obtenu en faisant le produit vectoriel des opérateurs position $\hat{\vec{r}}$ et impulsion $\hat{\vec{p}}$. On rappelle que l'action de l'opérateur impulsion sur les fonctions d'onde spatiales est $-i\hbar \vec{\nabla}$. On a donc

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} = -\mathrm{i}\hbar \begin{pmatrix} r \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r}r \\ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi} \end{pmatrix} = -\mathrm{i}\hbar \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{-1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \end{pmatrix},$$

^{6.} Notez la permutation circulaire qui permet de passer d'une de ces relations à l'autre.

^{7.} Notez que l'on peut faire une analogie entre un S&G pour des atomes et un polariseur pour des photons. La situation de la cascade des 3 S&G décrite ici correspondrait à la succession de deux polariseurs de même axe, entre lesquels on intercalerait un troisième polariseur dont l'axe est tourné de $\pi/4$. Des S&G tournés de $\pi/2$, correspondent donc à des polariseurs tournés de $\pi/4$.

où l'on a effectué le calcul en coordonnées sphériques. Dans le cas d'un S&G orienté suivant l'axe O_z , c'est la composante suivant cet axe du moment magnétique qui intervient. Il faut donc étudier la composante suivant ce même axe du moment cinétique orbital : $\hat{L}_z = \hat{\vec{L}}.\vec{u}_z$. Pour calculer ce produit scalaire, on doit exprimer \vec{u}_z coordonnées sphériques. On a $\vec{u}_z = \cos\theta \vec{u}_r - \sin\theta \vec{u}_{\theta}$, d'où

$$\widehat{L}_z = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \tag{10.3}$$

Éléments propres de \hat{L}_z : Supposons que $|\Psi\rangle$ soit un état propre de \hat{L}_z associé à la valeur propre M. On a donc $\hat{L}_z |\Psi\rangle = M |\Psi\rangle$. Faisons le même tour de passe-passe que dans la partie ??, où nous avons transformé une équation algébrique en équation différentielle sur une fonction d'onde ⁸. Cela nous avait permis de trouver la fonction d'onde de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. Pour faire apparaître une fonction d'onde nous avons projeté l'équation sur $|\hat{r}\rangle$, ket propre de l'opérateur position. Dans le cas présent, on obtient

$$egin{aligned} &\langle \vec{r} | \hat{L}_z | \Psi
angle = M \, \langle \vec{r} | \Psi
angle \ &-\mathrm{i} \hbar rac{\partial \Psi}{\partial \phi} = M \Psi(r, heta, \phi) \end{aligned}$$

Le terme de droite fait apparaître la fonction d'onde (projection du ket $|\Psi\rangle$ sur un ket propre de l'opérateur position), le terme de gauche revient à appliquer l'opérateur différentiel \hat{L}_z à la fonction d'onde $\Psi(r, \theta, \phi)$. L'équation différentielle obtenue s'intègre en $\Psi(r, \theta, \phi) = f(r, \theta)e^{im\phi}$, où f est une fonction ne dépendant pas de ϕ , et où l'on a posé $m = M/\hbar$. La fonction d'onde propre $\Psi(r, \theta, \phi)$ est une fonction continue, donc en particulier elle est continue pour la variable ϕ . ϕ variant sur un intervalle 2π , la continuité en ϕ impose la périodicité de période 2π : après un tour autour de l'axe O_z , la fonction d'onde doit retrouver la même valeur, sinon elle serait discontinue. On a donc



La projection du moment cinétique orbital sur l'axe O_z est donc quantifiée, elle ne peut prendre que des valeurs multiples de \hbar : {..., $-2\hbar$, $-\hbar$, $0, \hbar, 2\hbar$, ...}. Sur la figure de droite, on a représenté schématiquement l'oscillation de la fonction d'onde lorsque l'on fait varier l'angle ϕ , pour plusieurs valeurs du nombre quantique m. Cette figure permet de voir le lien entre continuité et périodicité. Par ailleurs, elle permet d'interpréter le nombre quantique m comme le nombre d'oscillations de la fonction d'onde lorsque ϕ varie de 0 à 2π . Comme \hat{L}_z a une infinité de valeur propres distinctes, on en déduit que l'espace de Hilbert associé est de dimension infinie.

Contradiction avec les résultats de l'expérience de S&G : Nous venons de constater que \hat{L}_z est quantifié. En se basant sur le modèle classique, on devrait avoir $\hat{\mu}_z \propto \hat{L}_z$, c'est à dire que $\hat{\mu}_z$ et \hat{L}_z devraient avoir le même nombre de valeurs propres distinctes, correspondant au nombre de tâches observées sur l'écran dans S&G. Or \hat{L}_z possède une infinité de valeurs propres. Dans S&G, on s'attendrait donc à voir une infinité de tâches équi-espacées sur l'écran. De plus, \hat{L}_z peut avoir 0 pour valeur propre, ce qui donnerait une tâche en 0 (c'est-à-dire qu'une partie des atomes ne serait pas déviée par le gradient de champ magnétique). Or ce n'est pas ce que l'on observe dans l'expérience

^{8.} Ce genre de manipulation n'est pas exigible ce semestre.

^{9.} On constate que chercher les valeurs propres et les vecteurs propres d'un opérateur agissant dans un espace de Hilbert revient à chercher les fonctions propres et valeurs propres associées à l'opérateur différentiel correspondant, agissant dans l'espace des fonctions d'ondes.

de S&G, dans laquelle $\hat{\mu}_z$ a seulement deux valeurs propres distinctes, dont aucune ne vaut 0. $\hat{\mu}_z$ ne peut donc pas être proportionnel au moment cinétique orbital : le modèle classique ne donne pas une description correcte du moment magnétique atomique.

10.4 Moment cinétique de spin

Il faut admettre que le moment magnétique mesuré dans l'expérience de S&G n'est pas proportionnel au moment cinétique orbital, associé à des degrés de libertés externes (position et impulsion). Il est proportionnel à un moment cinétique associé à un degré de liberté interne. C'est quelque chose de purement quantique qui n'a aucun équivalent classique. Dans le cas général, on a donc

$$\hat{\mu}_z = \gamma \widehat{S}_z,\tag{10.4}$$

où \hat{S}_z est l'observable projection du moment cinétique de spin (ou moment cinétique intrinsèque) sur l'axe O_z . Le facteur γ dépend de la particule considérée ¹⁰. Dans le cas de l'électron on a $\gamma = g\gamma_0$, où γ_0 est le facteur gyromagnétique de l'électron introduit dans la section 10.1, et où g est le facteur de Landé qui vaut approximativement 2 dans le cas de l'électron ¹¹.

Valeurs propres de \hat{S}_z : La dimension de \hat{S}_z doit être celle d'un moment cinétique. Dans S&G, l'écart entre les deux tâches sur l'écran permet de déterminer une valeur du moment magnétique μ_0 . La valeur mesurée dans une expérience réelle est compatible avec un moment magnétique $\mu_0 \approx \gamma_0 \hbar$. Lorsque vous étudierez la théorie générale du moment cinétique au second semestre, vous montrerez que les valeurs propres de \hat{S}_z sont $\pm \hbar/2$, ce qui permet d'expliquer les valeurs mesurées dans S&G, le facteur de Landé valant approximativement 2. Bien que ne l'ayant pas montré rigoureusement ici, on

retiendra que les valeurs propres de \hat{S}_z sont $\pm \hbar/2$, d'où l'expression *spin 1/2*.

Récapitulatif des résultats à connaître sur le spin 1/2: Maintenant que nous connaissons le facteur multiplicatif γ entre $\hat{\mu}_z$ et \hat{S}_z , nous pouvons transcrire tous les résultats obtenus pour les composantes du moment magnétique, en résultats sur les composantes du moment cinétique de spin. Ce sont ces résultats qu'il faudra retenir¹².

- 1. $\mathcal{B}_z \equiv \{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$ est aussi une base de vecteurs propres de \widehat{S}_z .
- 2. Les valeurs propres ¹³ de $\widehat{S}_{x,y,z}$ sont $\pm \hbar/2$.
- 3. Les matrices des composantes du spin dans la base \mathcal{B}_z sont

$$(\widehat{S}_x)_{\mathcal{B}_z} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \qquad (\widehat{S}_y)_{\mathcal{B}_z} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{i}\\ \mathbf{i} & 0 \end{pmatrix} \qquad \qquad (\widehat{S}_z)_{\mathcal{B}_z} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{10.5}$$

4. Les valeurs propres de ces 3 matrices sont $\pm \hbar/2$.

résultats.

Les résultats pour le moment magnétique sont intrinsèquement liés à l'expérience de S&G. Ceux pour le spin ne sont pas liés à une certaine situation expérimentale, ni même à une certaine particule de spin 1/2, ils sont très généraux.
 L'espace est isotrope, donc quelle que soit l'orientation du S&G (four + aimant + écran), on doit trouver les mêmes

^{10.} En fait, plus précisément, si la particule est composée (un atome par exemple) ce coefficient dépend même de l'état dans lequel se trouve la particule.

^{11.} Ce facteur de Landé de l'électron peut être prédit théoriquement et mesuré dans des expériences. La valeur actuelle de ce facteur est g = -2.002 319 304 362 56(35) (NIST CODATA). Il y a un accord parfait entre théorie et expérience jusqu'à la 14ème décimale. Au delà, les expériences ne sont pas encore suffisamment précises pour trancher. Cet accord est l'une des grandes réussite de la théorie quantique, que l'on peine à mettre en défaut expérimentalement.

5. Les vecteurs propres associés, exprimés dans la base ¹⁴ \mathcal{B}_z sont

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_z \pm |-\rangle_z) \qquad |\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_z \pm i |-\rangle_z) \qquad |\pm\rangle_z$$

On peut écrire ces matrices en fonctions des matrices dites *de Pauli* :
$$\left(\widehat{S}_{x,y,z}\right)_{\mathcal{B}_z} = \frac{\hbar}{2} \sigma_{x,y,z}.$$

- 6. On peut écrire ces matrices en fonctions des matrices dites de Pauli :
- 7. Les relations de commutation entre composantes sont

$$[\widehat{S}_x, \widehat{S}_y] = i\hbar \widehat{S}_z \qquad \qquad [\widehat{S}_y, \widehat{S}_z] = i\hbar \widehat{S}_x \qquad \qquad [\widehat{S}_z, \widehat{S}_x] = i\hbar \widehat{S}_y$$

Elles signifient que l'on ne peut connaître simultanément deux composantes du spin.

Évolution temporelle d'un spin 1/2 dans un champ magnétique uniforme statique : Le moment cinétique de spin étant relié à un moment magnétique, il interagit avec un champ magnétique. L'hamiltonien d'interaction s'écrit $\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}$. Supposons que $\vec{B} = B\vec{u}_z$. On peut exprimer l'hamiltonien en fonction de \hat{S}_z en utilisant la relation de proportionnalité entre spin et moment magnétique. On obtient

$$\widehat{H} = -\gamma B \widehat{S}_z. \tag{10.6}$$

Les états propres de \hat{H} sont donc les mêmes que les états propres de \hat{S}_z : ce sont les états $|\pm\rangle_z$ associés aux énergies propres $\mp \gamma B\hbar/2$. Faisons évoluer dans le temps un état quelconque, après l'avoir décomposé sur la base des états stationnaires :

$$\begin{array}{ll} \text{état initial}: & |\Psi(0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2} \left|+\right\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2} e^{i\phi} \left|-\right\rangle_z \\ \text{état à l'instant t}: & |\Psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2} e^{i\gamma Bt/2} \left|+\right\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2} e^{i\phi} e^{-i\gamma Bt/2} \left|-\right\rangle_z \end{array}$$

On peut déterminer l'évolution temporelle des valeurs moyennes des composantes du spin dans l'état $|\Psi(t)\rangle$ (à faire chez vous). On trouve

$$\langle \widehat{S}_x \rangle(t) = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos(\phi - \gamma B t)$$
$$\langle \widehat{S}_y \rangle(t) = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin(\phi - \gamma B t)$$
$$\langle \widehat{S}_z \rangle(t) = \frac{\hbar}{2} \cos \theta$$

La composante $\langle \hat{S}_z \rangle(t) \rangle$ est constante, tandis que les composantes $\langle \hat{S}_x \rangle(t)$ et $\langle \hat{S}_y \rangle(t)$ décrivent un cercle à la fréquence angulaire $\omega_L \equiv |\gamma B|$ dans le plan ${}_xO_y$. On retrouve donc le mouvement de précession ¹⁵ attendu dans un modèle classique (cf. section 10.1). Regardons maintenant comment évolue l'état du système dans la sphère de Bloch au cours du temps. On sait que le vecteur d'état précesse autour de l'axe O_z (cf. section 10.1). Au bout d'un certain temps T il revient sur lui-même, après avoir effectué une révolution. Ce temps T vérifie $|\Psi(t)\rangle = |\Psi(t+T)\rangle$. En utilisant l'expression de $|\Psi(t)\rangle$, on voit que

$$T = \frac{4\pi}{|\gamma B|} = \frac{4\pi}{\omega_L} = 2 \times \frac{2\pi}{\omega_L}.$$

^{14.} Remarquez que la matrice de passage entre les bases \mathcal{B}_{\S} et \mathcal{B}_{\ddagger} n'est autre que la matrice d'Hadamard déjà rencontrée dans le chapitre précédent.

^{15.} Attention, ce mouvement de précession est un mouvement de la moyenne du spin dans l'espace réel. Il ne faut pas le confondre avec le mouvement de précession vu dans le chapitre précédent (cf. section ??), qui était la précession du vecteur d'état dans la sphère de Bloch.

Or le temps de révolution de la moyenne du spin autour du champ magnétique (dans l'espace réel) est $2\pi/\omega_L$. On en déduit que lorsque la valeur moyenne du spin effectue une révolution autour du champ magnétique dans l'espace réel, l'état du système effectue deux révolutions autour de l'axe vertical de la sphère de Bloch. Après une révolution du spin autour de \vec{B} , l'état du système est $|\Psi(T/2)\rangle = -|\Psi(0)\rangle = e^{i\pi} |\Psi(0)\rangle$. L'état du système acquiert une phase globale π . Jusqu'ici, nous avons toujours laissé tomber les phase globales en disant qu'elles disparaissent quand on calcule des probabilités de mesure, ou des valeurs moyennes. En fait on ne sait pas mesurer des phase absolues, mais on sait mesurer des phases relatives (comme en optique). On peut faire interférer des électrons dont le spin a fait un tour avec des électrons dont le spin n'a pas évolué. Pour cela il faut utiliser un interféromètre de Mach-Zender pour des particules de spin 1/2. Lorsque l'on applique un champ magnétique uniquement dans l'un des bras, de telle sorte que le spin des particules effectue une rotation de 2π , on observe un décalage des franges d'interférences. Cette phase de π est donc détectable dans une expérience, et elle est caractéristique de la particule de spin 1/2.

Évolution temporelle d'un spin 1/2 dans un champ magnétique uniforme oscillant dans le temps : Ce cas est assez similaire au cas de la molécule d'ammoniac en champ électrique oscillant. Il sera traité en TD. Le phénomène observé est l'*oscillation de Rabi*, qui dans le contexte d'un proton se nomme *résonance magnétique nucléaire*.

10.5 Conclusion

- Le spin est un degré de liberté interne sans équivalent classique.
- Il est proportionnel au moment magnétique : il interagit avec un champ magnétique.
- On le mesure grâce à un dispositif de type Stern & Gerlach.
- C'est un moment cinétique quantifié qui prend les valeurs demi-entières $\pm \hbar/2$.
- --La restriction de l'espace des états à ce degré de liberté est un système à deux états.
- En présence d'un champ magnétique, le système a deux énergies non dégénérées (système à deux niveaux d'énergie).
- On peut représenter l'état d'un spin 1/2 sur la sphère de Bloch.
- Dans le cas d'un spin 1/2, il faut faire 2 tours autour du champ magnétique pour retrouver le même état.