Particule de spin 1/2. Systèmes à deux niveaux

I) Particule de spin 1/2. Quantification du moment cinétique.

S_z : observable de valeurs propres $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$. Les vecteurs propres orthonormés correspondants sont notés $|+\rangle$ et $|-\rangle$. On aura :

$$S_z\,|+\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|+\rangle$$
$$S_z\,|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}\,|-\rangle$$
$$\langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1 \qquad \langle +|-\rangle = \langle -|+\rangle = 0$$: orthonormalisation

$$|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = \mathbb{1}$$: relation de fermeture

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$$: vecteur général avec $|\alpha|^2+|\beta|^2=1$

Dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ on a les matrices :

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

Pour l'observable $S_u = \vec{S}.\vec{u}$ on aura dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$S_u = S_x .\sin\theta\cos\varphi + S_y \sin\theta\sin\varphi + S_z\cos\theta$$

$$S_u = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

Les vecteurs propres de S_x, S_y et S_u seront :

$$\left\{ |\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|+\rangle \pm |-\rangle\right\} \right. \qquad (S_x)$$

$$\left\{ |\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|+\rangle \pm i|-\rangle\right\} \right. \qquad (S_y)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} |+\rangle_u = \cos\frac{\theta}{2}.e^{-i\varphi/2}\,|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}.e^{i\varphi/2}\,|-\rangle \\ |-\rangle_u = -\sin\frac{\theta}{2}\,e^{-i\varphi/2}\,|+\rangle + \cos\frac{\theta}{2}.e^{i\varphi/2}\,|-\rangle \end{array} \right. \qquad (S_u)$$

II) Illustration des postulats de la quantique sur le cas d'un spin 1/2

- Dans le cas le plus général on a des états de spin de la forme :

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle \qquad \text{avec} \quad |\alpha|^2+|\beta|^2 = 1$$

Soit θ tel que $\quad |\alpha| = \cos\frac{\theta}{2} \qquad |\beta| = \sin\frac{\theta}{2} \qquad 0 \leq \theta \leq \pi$

on a donc $\operatorname{tg}\frac{\theta}{2} = \left|\frac{\beta}{\alpha}\right|$ et on pose : $\varphi = \operatorname{Arg}\beta - \operatorname{Arg}\alpha$; $\chi = \operatorname{Arg}\beta + \operatorname{Arg}\alpha$

donc : $\operatorname{Arg}\beta = \frac{1}{2}(\chi + \varphi)$ et $\operatorname{Arg}\alpha = \frac{1}{2}(\chi - \varphi)$

d'où : $|\psi\rangle = e^{i\frac{\chi}{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\frac{\varphi}{2}}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\frac{\varphi}{2}}|-\rangle\right)$

. Méthode expérimentale : Appareil de Stern et Gerlach

III) Etude générale des systèmes à deux niveaux

. Base : système des deux états propres $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ de l'hamiltonien H_0, de valeurs propres respectives E_1 et E_2 :

$$\begin{cases} H_0|\varphi_1\rangle = E_1|\varphi_1\rangle \\ H_0|\varphi_2\rangle = E_2|\varphi_2\rangle \end{cases}$$

Base orthonormée $\Rightarrow$ $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$ $\quad i,j = 1,2$

Si on tient compte d'une perturbation (interne ou externe au système) : $H = H_0 + W$

on aura alors :

$$\begin{cases} H|\psi_+\rangle = E_+|\psi_+\rangle \\ H|\psi_-\rangle = E_-|\psi_-\rangle \end{cases}$$

on a la matrice :

$$W = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}$$

W_{11} et W_{22} réels

$\overline{W_{12}} = W_{21}$

. Dans la base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ on a :

$$H = \begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix}$$

d'où les valeurs propres :

$$E_\pm = \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}$$

et les vecteurs propres associés à E_+ et E_- :

$$\begin{cases} |\psi_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle \\ |\psi_-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}\, e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle \end{cases}$$

avec :

$$\operatorname{tg}\theta = \frac{2|W_{12}|}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \quad (0 \leq \theta \leq \pi) \quad ; \quad W_{21} = |W_{21}|\, e^{i\varphi}$$

• Simplification : on suppose que $W_{11} = W_{22} = 0$. Donc on aura :

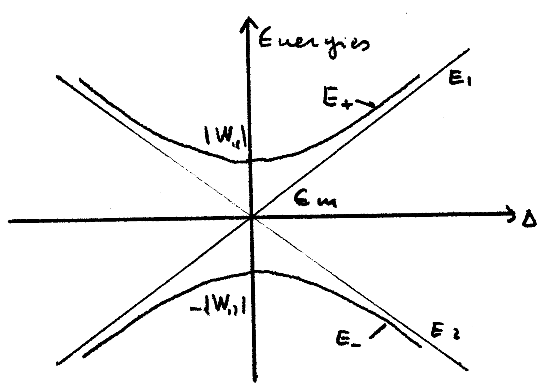
$$E_\pm = \frac{1}{2}(\epsilon_1 + \epsilon_2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 + 4|W_{12}|^2}$$

$$\operatorname{tg}\theta = \frac{2|W_{12}|}{E_1 - E_2} \qquad 0 \leq \theta \leq \pi$$

on pose : $E_m = \frac{1}{2}(\epsilon_1 + \epsilon_2)$ et $\Delta = \frac{1}{2}(E_1 - E_2)$ d'où :

$$E_\pm = E_m \pm \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2}$$

on a $\forall \Delta$: $|E_+ - E_-| > |E_1 - E_2|$ (Le couplage écarte les fréquences propres)



. Près des asymptotes ($|\Delta| \gg |W_{12}|$) on a :

$$E_\pm \simeq E_m \pm \Delta\left(1 + \frac{1}{2}\left|\frac{W_{12}}{\Delta}\right|^2 + \dots\right)$$

. Au centre de l'hyperbole ($\epsilon_2 = \epsilon_1$ ou $\Delta = 0$)

$$\epsilon_\pm = \epsilon_m \pm |W_{12}|$$

(l'effet de couplage est beaucoup plus important lorsque les deux niveaux non perturbés ont même énergie)

On a aussi : $\operatorname{tg}\theta = \frac{|W_{12}|}{\Delta}$

Si $\Delta \ll |W_{12}|$ (couplage fort) $\theta \sim \frac{\pi}{2}$

Si $\Delta \gg |W_{12}|$ (couplage faible) $\theta \sim 0$

Au centre de l'hyperbole, lorsque $\epsilon_2 = \epsilon_1$ ($\Delta = 0$) on a :

$$\begin{cases} |\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle\right\} \\ |\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{-e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle\right\} \end{cases}$$

Près des asymptotes, lorsque $\Delta \gg |W_{12}|$ on a au premier ordre en $\frac{|W_{12}|}{\Delta}$:

$$\begin{cases} |\psi_+\rangle = e^{-i\varphi/2}\left\{|\varphi_1\rangle + e^{i\varphi}\frac{|W_{12}|}{2\Delta}|\varphi_2\rangle + \dots\right\} \\ |\psi_-\rangle = e^{i\varphi/2}\left\{|\varphi_2\rangle - e^{-i\varphi}\frac{|W_{12}|}{2\Delta}|\varphi_1\rangle + \dots\right\} \end{cases}$$

• Aspect dynamique : oscillation du système entre les deux états non perturbés.

$|\psi(t)\rangle = a_1(t)|\varphi_1\rangle + a_2(t)|\varphi_2\rangle$: vecteur d'état du système à l'instant t.

$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = (H_0 + W)|\psi(t)\rangle$ évolution de $|\psi(t)\rangle$ en présence du couplage W.

Nous aurons sur les vecteurs de base $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} a_1(t) = E_1\, a_1(t) + W_{12}\, a_2(t) \\ i\hbar \frac{d}{dt} a_2(t) = W_{21}\, a_1(t) + E_2\, a_2(t) \end{cases}$$

On a un système linéaire d'équations différentielles homogènes couplées

On a : $|\psi(0)\rangle = \lambda|\psi_+\rangle + \mu|\psi_-\rangle$ (λ et μ cte)

d'où : $|\psi(t)\rangle = \lambda e^{-iE_+t/\hbar}|\psi_+\rangle + \mu e^{-iE_-t/\hbar}|\psi_-\rangle$

Le système effectue une oscillation entre les deux états non perturbés $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$.

On suppose que à $t=0$: $|\psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle$.

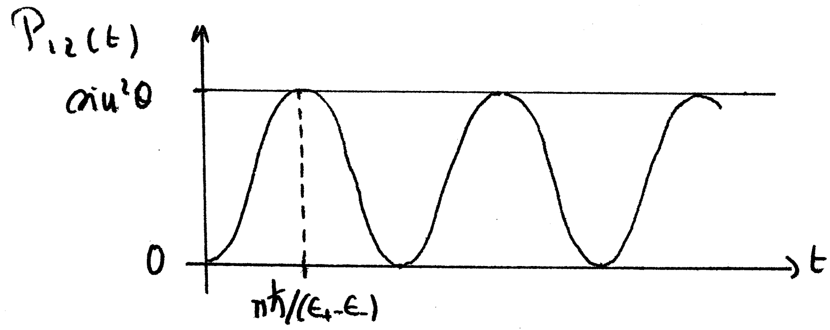
Nous avons : $|\psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle = e^{i\varphi/2}\left[\cos\frac{\theta}{2}|\psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}|\psi_-\rangle\right]$

donc : $|\psi(t)\rangle = e^{i\varphi/2}\left\{\cos\frac{\theta}{2}\, e^{-iE_+t/\hbar}|\psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}\, e^{-iE_-t/\hbar}|\psi_-\rangle\right\}$

L'amplitude de probabilité de trouver à l'instant t le système dans l'état $|\varphi_2\rangle$ est alors : $\langle\varphi_2|\psi(t)\rangle = e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\left\{e^{-iE_+t/\hbar} - e^{-iE_-t/\hbar}\right\}$

donc $P_{12}(t) = |\langle\varphi_2|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2\theta \cdot \sin^2\left[\left(\frac{E_+ - E_-}{2\hbar}\right)t\right]$

d'où : $P_{12}(t) = \frac{4|W_{12}|^2}{4|W_{12}|^2 + (E_1 - E_2)^2}\sin^2\left[\left(4|W_{12}|^2 + (E_1-E_2)^2\right)^{1/2}\frac{t}{2\hbar}\right]$



IV) Les matrices de Pauli

On introduit $\vec{\sigma}$ défini par : $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\cdot\vec{\sigma}$

S_z : observable de valeurs propres $\pm\frac{\hbar}{2}$ et de vecteurs propres $|+\rangle$ et $|-\rangle$

• Matrices de Pauli :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

• Valeurs propres de σ_x, σ_y et σ_z : $\lambda = \pm 1$

• Vecteurs propres :

$$\left| \begin{array}{l} \sigma_x |\pm\rangle_x = \pm |\pm\rangle_x \\ \sigma_y |\pm\rangle_y = \pm |\pm\rangle_y \\ \sigma_z |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle \end{array} \right.$$

avec : $|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |+\rangle \pm |-\rangle \right\}$ et $|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |+\rangle \pm i |-\rangle \right\}$

• Propriétés. (on prendra $i = x, y, z$)

. $\mathrm{Det}(\sigma_i) = -1$

. $\mathrm{Tr}(\sigma_i) = 0$

. $\sigma_i^2 = I$

. $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\, \varepsilon_{ijk}\, \sigma_k$

. $\sigma_j \sigma_k = i \sum \varepsilon_{jkp}\, \sigma_p + \delta_{kj} I$

. $(\vec{\sigma}.\vec{A})(\vec{\sigma}.\vec{B}) = \vec{A}.\vec{B}.I + i\vec{\sigma}(\vec{A} \times \vec{B})$

• M : matrice quelconque :

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}$$

on peut écrire M sous la forme :

$$M = a_0 I + \vec{a}.\vec{\sigma}$$

avec a_0 complexe et $\vec{a}(a_x, a_y, a_z)$ où a_x, a_y, a_z complexes.

on aura : $a_0 = \frac{1}{2} \mathrm{Tr}(M)$ et $\vec{a} = \frac{1}{2} \mathrm{Tr}(M\vec{\sigma})$

V) Diagonalisation d'une matrice hermitique 2×2

• H : matrice hermitique

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$$

H_{11} et H_{22} réels et $\overline{H_{21}} = H_{12}$

Base choisie : $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$

on pose :

$$K = \begin{pmatrix} 1 & 2H_{12}/(H_{11}-H_{22}) \\ 2H_{21}/(H_{11}-H_{22}) & -1 \end{pmatrix}$$

H s'écrira alors :

$$H = \frac{1}{2}(H_{11}+H_{22}).I + \frac{1}{2}(H_{11}-H_{22}).K$$

H et K ont mêmes vecteurs propres : $|\psi_\pm\rangle$. on aura :

$$\begin{cases} H|\psi_\pm\rangle = E_\pm|\psi_\pm\rangle \\ K|\psi_\pm\rangle = \kappa_\pm|\psi_\pm\rangle \end{cases}$$

on a : $$E_\pm = \frac{1}{2}(H_{11}+H_{22}) + \frac{1}{2}(H_{11}-H_{22}).\kappa_\pm$$

- On pose :

$$\operatorname{tg}\theta = \frac{2|H_{21}|}{H_{11}-H_{22}} \quad \text{avec} \quad 0 \leq \theta \leq \pi$$

$$H_{21} = |H_{21}|e^{i\varphi} \quad \text{avec} \quad 0 \leq \varphi < 2\pi$$

$$H_{12} = |H_{12}|e^{-i\varphi}$$

d'où la matrice K :

$$K = \begin{pmatrix} 1 & \operatorname{tg}\theta\, e^{-i\varphi} \\ \operatorname{tg}\theta\, e^{i\varphi} & -1 \end{pmatrix}$$

- Valeurs propres de K. On trouve : $\kappa_\pm = \pm\frac{1}{\cos\theta}$

donc : $\kappa_\pm = \pm\left((H_{11}-H_{22})^2+4|H_{12}|^2\right)/(H_{11}-H_{22})$

- Valeurs propres de H. on trouve :

$$E_\pm = \frac{1}{2}(H_{11}+H_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(H_{11}-H_{22})^2+4|H_{12}|^2}$$

on a : $$\operatorname{tr}(H) = E_+ + E_- = H_{11}+H_{22}$$

$$\operatorname{Det}(H) = E_+E_- = H_{11}.H_{22} - |H_{12}|^2$$

- Vecteurs propres normés de H. on trouve :

$$\begin{cases} |\psi_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle \\ |\psi_-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle \end{cases}$$