Cours de mécanique quantique.

Emmanuel FROMAGER

Moments magnétiques orbitalaires et de spin

I – Particule chargée dans un champ électromagnétique uniforme : théorie classique.

Force de Lorentz : $\vec{F} = q\vec{\mathcal{E}} + q\vec{v} \wedge \vec{B}$

- q : charge de la particule
- $\vec{\mathcal{E}}$: champ électrique uniforme
- $\vec{v}$: vitesse de la particule
- $\vec{B}$: champ magnétique uniforme

Considérons plusieurs situations :

$\boxed{\vec{\mathcal{E}} \neq \vec{0} \text{ et } \vec{B} = \vec{0}}$ $\quad \vec{F} \longrightarrow q\vec{\mathcal{E}} = -\vec{\nabla} V$

où $V = -q\vec{r}.\vec{\mathcal{E}}$. En effet

$$\frac{\partial V}{\partial x} = -q\mathcal{E}_x, \quad \frac{\partial V}{\partial y} = -q\mathcal{E}_y \quad \text{et} \quad \frac{\partial V}{\partial z} = -q\mathcal{E}_z$$

avec $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}_x \vec{e_x} + \mathcal{E}_y \vec{e_y} + \mathcal{E}_z \vec{e_z}$.

En introduisant $\vec{D} = q\vec{r}$ il vient

$$\boxed{V = -\vec{D}.\vec{\mathcal{E}}}$$

- V : énergie potentielle d'interaction avec $\vec{\mathcal{E}}$
- $\vec{D}$: moment dipolaire électrique

$\boxed{\vec{B} \neq \vec{0} \text{ et } \vec{\mathcal{E}} = \vec{0}}$ $\quad \vec{F} \longrightarrow \underbrace{q\vec{v} \wedge \vec{B}}$

cette quantité dépend de la vitesse et non de la position.

Il n'y a pas d'énergie potentielle d'interaction associée à la force de Lorentz magnétique. En effet, d'après la loi de Newton,

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = q\vec{v} \wedge \vec{B}$$

$$\Rightarrow \quad m\,\vec{v}.\frac{d\vec{v}}{dt} = q\underbrace{(\vec{v} \wedge \vec{B}).\vec{v}}_{0} \rightarrow \frac{d}{dt}\left[\frac{1}{2}mv^2\right] = 0$$

soit $\frac{1}{2}mv^2 = E_c = \text{constante} \longrightarrow v = \text{constante}$

(E_c : énergie cinétique)

Les effets du champ magnétique se font ressentir sur le vecteur vitesse, pas sur sa norme.

Question importante : Comment décrire l'interaction du champ magnétique avec la particule chargée en mécanique quantique ? L'énergie étant cinétique, on est tenté d'écrire

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \longrightarrow \hat{H} = \frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} \quad \text{impossible !}$$

Car dans ce cas le champ magnétique est absent de la théorie quantique. Le problème vient du passage $\frac{1}{2}mv^2 \longrightarrow \frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m}$

qui est faux. Le formalisme Lagrangien permet de clarifier ce point.

II _ Equations de Lagrange

Le formalisme lagrangien consiste à réécrire les équations de Newton pour une particule sous la forme

$$\boxed{\begin{aligned} &\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_x} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0 \quad \forall t \\ &\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_y} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} = 0 \quad \forall t \\ &\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_z} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} = 0 \quad \forall t \end{aligned}}$$

où $\vec{v} \equiv (v_x, v_y, v_z)$ et $\vec{r} \equiv (x, y, z)$

et $\mathcal{L} \equiv \mathcal{L}(x, y, z, v_x, v_y, v_z, t) \longleftarrow$ lagrangien (fonction à déterminer)

Une fois la fonction de Lagrange $\mathcal{L}$ connue, on détermine l'impulsion $\vec{p} \equiv \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_x}, \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_y}, \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_z}\right)$. Le passage à la théorie quantique se fait alors comme suit

$$p_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_x} \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}_x$$

$$p_y = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_y} \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} = \hat{p}_y \quad \text{et} \quad p_z = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_z} \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} = \hat{p}_z$$

<u>Exemple 1 :</u> particule ayant une énergie potentielle d'interaction V. Avec $\mathcal{L} = T - V$

où $T = \frac{m}{2}(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$ et $V \equiv V(x, y, z)$

- $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x}$, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} = -\frac{\partial V}{\partial y}$, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} = -\frac{\partial V}{\partial z}$
- $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_x} = m v_x$, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_y} = m v_y$, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_z} = m v_z$

Les équations de Lagrange donnent alors

$$\left.\begin{aligned} m\frac{dv_x}{dt} &= -\frac{\partial V}{\partial x} \\ m\frac{dv_y}{dt} &= -\frac{\partial V}{\partial y} \\ m\frac{dv_z}{dt} &= -\frac{\partial V}{\partial z} \end{aligned}\right\} \text{ on retrouve les équations de Newton !}$$

- Les composants du vecteur impulsion sont donc

$$p_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_x} = m v_x$$

$$p_y = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_y} = m v_y \quad \text{et} \quad p_z = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_z} = m v_z$$

<u>Conclusion :</u> Dans ce cas, l'impulsion $\vec{p}$ correspond à la quantité de mouvement $m\vec{v}$.

Exemple 2 : particule d'énergie potentielle d'interaction V et de charge q, plongée dans un champ magnétique uniforme $\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}$

potentiel vecteur $\vec{A} \equiv \vec{A}(x, y, z)$

En prenant $\boxed{\mathcal{L} = T - V + q\,\vec{A}\cdot\vec{v}}$

il vient $\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = -\dfrac{\partial V}{\partial x} + q\left[v_x \dfrac{\partial A_x}{\partial x} + v_y \dfrac{\partial A_y}{\partial x} + v_z \dfrac{\partial A_z}{\partial x}\right] = -\dfrac{\partial V}{\partial x} + q\,\vec{v}\cdot\dfrac{\partial \vec{A}}{\partial x}$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_x} = m v_x + q A_x \Rightarrow \frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_x} = m\frac{dv_x}{dt} + q\left[\underbrace{\frac{dx}{dt}}_{v_x}\frac{\partial A_x}{\partial x} + \underbrace{\frac{dy}{dt}}_{v_y}\frac{\partial A_x}{\partial y} + \underbrace{\frac{dz}{dt}}_{v_z}\frac{\partial A_x}{\partial z}\right]$$

Les équations de Lagrange donnent alors

$$m\frac{dv_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} + q\underbrace{\left[v_y\underbrace{\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right)}_{(\vec{\nabla}\wedge\vec{A})_z = B_z} + v_z\underbrace{\left(\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z}\right)}_{-(\vec{\nabla}\wedge\vec{A})_y = -B_y}\right]}_{(\vec{v}\wedge\vec{B})_x}$$

on retrouve l'équation de Newton (projetée sur l'axe des x) avec la force magnétique de Lorentz.

Notations : • il est pratique d'écrire les équations de Lagrange sous la forme

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}} = 0 .$$

Ici $\mathcal{L} = T - V + q\,\vec{A}\cdot\vec{v}$ et

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{r}} + q\,\frac{\partial \vec{A}}{\partial \vec{r}}\cdot\vec{v} = -\vec{\nabla}V + q\,\frac{\partial \vec{A}}{\partial \vec{r}}\cdot\vec{v}$$

soit $\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}} = -\vec{\nabla}V + q\left[(\vec{\nabla}A_x)\cdot v_x + (\vec{\nabla}A_y)\cdot v_y + (\vec{\nabla}A_z)\cdot v_z\right]$

et $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + q\vec{A} = \vec{p}$ impulsion

quantité de mouvement que l'on notera $\vec{\pi}$

ici $\boxed{\vec{\pi} = \vec{p} - q\vec{A} \neq \vec{p}\,!}$

• On vérifie alors que $\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v}} = m\frac{d\vec{v}}{dt} + q\frac{d\vec{A}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}}$

conduit à $$m\frac{d\vec{v}}{dt} = -\vec{\nabla}V + q\underbrace{\left[\frac{\partial \vec{A}}{\partial \vec{r}}\cdot\vec{v} - \frac{d\vec{A}}{dt}\right]}_{\vec{\mathcal{F}}}$$

Calcul de $\vec{\mathcal{F}}$: $$\mathcal{F}_i = \frac{\partial A_i}{\partial x_i}v_i + \frac{\partial A_j}{\partial x_i}v_j + \frac{\partial A_k}{\partial x_i}v_k - \frac{dA_i}{dt}$$

composante i

i, j, k est une permutation circulaire de 1, 2, 3

où $$\frac{dA_i}{dt} = v_i\frac{\partial A_i}{\partial x_i} + v_j\frac{\partial A_i}{\partial x_j} + v_k\frac{\partial A_i}{\partial x_k}$$

de sorte que $$\boxed{\mathcal{F}_i = v_j\underbrace{\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right)}_{(\vec{\nabla}\wedge\vec{A})_k = B_k} - v_k\underbrace{\left(\frac{\partial A_i}{\partial x_k} - \frac{\partial A_k}{\partial x_i}\right)}_{(\vec{\nabla}\wedge\vec{A})_j = B_j} = (\vec{v}\wedge\vec{B})_i}$$

soit $$m\frac{d\vec{v}}{dt} = -\vec{\nabla}V + q\vec{v}\wedge\vec{B} \qquad (1)$$

→ équations de Newton retrouvées!

<u>Commentaire :</u> expression de l'énergie en fonction de l'impulsion.

D'après (1) $$m\vec{v}\cdot\frac{d\vec{v}}{dt} = -\vec{v}\cdot\vec{\nabla}V = -\frac{d}{dt}V$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\Big[\underbrace{\tfrac{1}{2}mv^2 + V}\Big] = 0$$

↓

énergie $E = \frac{1}{2m}\pi^2 + V$

soit $\boxed{E = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + V}$

III – Moment magnétique orbitalaire en mécanique quantique

• On considère un champ magnétique <u>uniforme</u> (B_x, B_y et B_z sont indépendants des variables d'espace x, y, z). On peut donc choisir $\boxed{\vec{A} = -\frac{1}{2}\,\vec{r} \wedge \vec{B}}$

En effet, avec ce choix, $A_i = -\frac{1}{2}\left(x_j B_k - x_k B_j\right)$

$$A_j = -\frac{1}{2}\left(x_k B_i - x_i B_k\right)$$

ainsi $(\vec{\nabla} \wedge \vec{A})_k$

$$= \frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} = +\frac{1}{2} B_k + \frac{B_k}{2} = B_k$$

soit $\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}$ (ok!)

• mécanique classique $\longrightarrow$ mécanique quantique

$$E = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + V \longrightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m}\left[(\hat{p}_x - q\hat{A}_x)^2 + (\hat{p}_y - q\hat{A}_y)^2 + (\hat{p}_z - q\hat{A}_z)^2\right] + \hat{V}$$

avec $\hat{A}_i = -\frac{1}{2}\left(\hat{x}_j B_k - \hat{x}_k B_j\right)$

si $i = 1 \longrightarrow \hat{A}_1 = \hat{A}_x = -\frac{1}{2}\left(\hat{y} B_z - \hat{z} B_y\right)$

• Ainsi

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{P}^2}{2m}}_{\hat{H}_0} + \hat{V} - \frac{q}{2m}\underbrace{\left[\hat{p}_x\hat{A}_x + \hat{A}_x\hat{p}_x + \hat{p}_y\hat{A}_y + \hat{A}_y\hat{p}_y + \hat{p}_z\hat{A}_z + \hat{A}_z\hat{p}_z\right]}_{\text{terme paramagnétique}} + \frac{q^2}{2m}\underbrace{\left[\hat{A}_x^2 + \hat{A}_y^2 + \hat{A}_z^2\right]}_{\text{terme diamagnétique}}$$

$\hat{H}_0$: hamiltonien en l'absence de champ magnétique

• Si le champ magnétique est faible, on peut négliger le terme diamagnétique, en première approximation.

De plus,

$$[\hat{p}_i, \hat{A}_i] = \underbrace{[\hat{p}_i, \hat{x}_j]}_{0}\left(-\frac{B_k}{2}\right) + \frac{1}{2} B_j \underbrace{[\hat{p}_i, \hat{x}_k]}_{0}$$

donc

$$\hat{H} \longrightarrow \hat{H}_0 - \frac{q}{m}\underbrace{\sum_{i=1}^{3} \hat{p}_i \hat{A}_i}$$

$$\sum_{i=1}^{3} -\frac{1}{2} B_k \hat{p}_i \hat{x}_j + \frac{1}{2} B_j \hat{p}_i \hat{x}_k$$

(i, j, k) permutation circulaire de $(1, 2, 3)$

$$= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3} B_k \underbrace{\left(\hat{p}_j \hat{x}_i - \hat{p}_i \hat{x}_j\right)}_{(\hat{\vec{r}} \wedge \hat{\vec{p}})_k = \hat{L}_k}$$

$$= \frac{1}{2}\,\vec{B} \cdot \hat{\vec{L}}$$

Conclusion : $\boxed{\hat{H} \simeq \hat{H}_0 - \frac{q}{2m}\,\vec{B}\cdot\hat{\vec{L}}}$

Interprétation du terme paramagnétique : en mécanique classique, une particule chargée ayant un moment cinétique orbitalaire $\vec{L}$ aura un moment magnétique $\vec{\mu}_L$, dit orbitalaire, $\vec{\mu}_L = \frac{q\vec{L}}{2m}$. L'interaction de ce moment magnétique avec le champ magnétique $\vec{B}$ est décrite par l'énergie potentielle d'interaction $-\vec{\mu}_L\cdot\vec{B}$.

IV_ Effet Zeeman

- On plonge un atome d'hydrogène dans un champ magnétique $\vec{B} = B\vec{e}_z$ dirigé suivant l'axe des z ($\vec{B}$ est uniforme)

$$\hat{H}_0 = \frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$ ← hamiltonien sans champ magnétique (non perturbé)

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{2m_e}B\hat{L}_z}$$ ← hamiltonien perturbé dont on cherche les états propres et énergies propres

- États non perturbés $|\psi_{n,l,m}\rangle$ avec

$$\hat{H}_0|\psi_{n,l,m}\rangle = -\frac{E_I}{n^2}|\psi_{n,l,m}\rangle, \qquad E_I \simeq 13{,}6\ \text{eV}$$

$$\hat{L}_z|\psi_{n,l,m}\rangle = m\hbar|\psi_{n,l,m}\rangle, \qquad \hat{L}^2|\psi_{n,l,m}\rangle = l(l+1)\hbar^2|\psi_{n,l,m}\rangle$$

$l \in \mathbb{N}$ $\quad 0 \le l \le n-1$

$m \in \mathbb{Z}$ $\quad -l \le m \le +l$

On constate que $|\psi_{n,l,m}\rangle$ reste état propre de $\hat{H}$ en présence du champ magnétique :

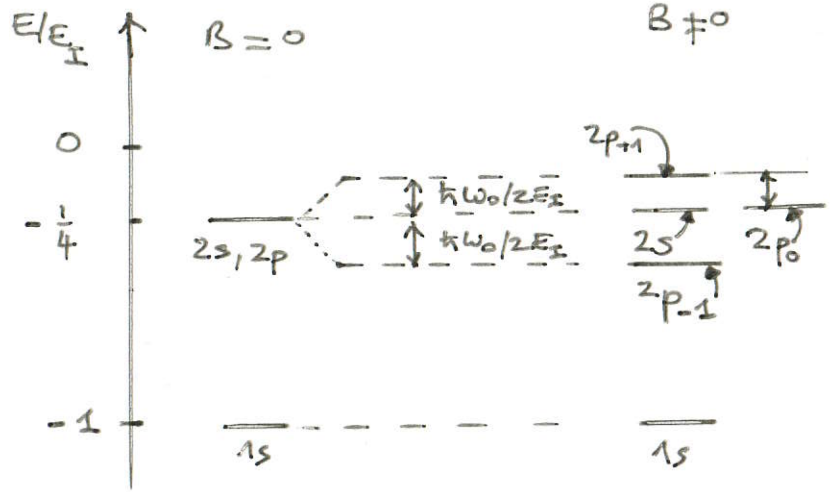
En effet

$$\hat{H}|\psi_{n,l,m}\rangle = \hat{H}_0|\psi_{n,l,m}\rangle + \frac{eB}{2m_e}\hat{L}_z|\psi_{n,l,m}\rangle$$

$$\hat{H}|\psi_{n,l,m}\rangle = \underbrace{\left(-\frac{E_I}{n^2} + \frac{eB}{2m_e}m\hbar\right)}_{E_{n,m}}|\psi_{n,l,m}\rangle$$

En posant $\omega_0 = \frac{eB}{m_e}$

il vient $\boxed{E_{n,m} = -\frac{E_I}{n^2} + \frac{m\hbar\omega_0}{2}}$



La modification du spectre due au champ magnétique décrite ainsi n'est pas en accord avec l'expérience.

Un autre effet Zeeman (dit "anormal") rentre en jeu. Il est lié à la rotation de l'électron sur lui même ("spin" en anglais)

V_ Théorie de Pauli pour l'électron

- Afin de décrire l'atome d'hydrogène en présence d'un champ magnétique uniforme, il est nécessaire de compléter la théorie de Schrödinger pour l'électron.
- On postule l'existence d'un moment magnétique de spin pour l'électron $\vec{\mu}_S = \frac{-e}{m_e}\vec{S}$ où $\vec{S}$ est décrit en théorie quantique par des opérateurs de moment cinétique $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ et $\hat{S}_z$.
- L'espace des états de spin de l'électron est déterminé par les états propres des opérateurs $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ et $\hat{S}_z$:

$$\hat{S}^2|s,m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2|s,m_s\rangle$$
$$\hat{S}_z|s,m_s\rangle = m_s\hbar\,|s,m_s\rangle$$

où s est a priori un entier ou un demi-entier naturel

et $m_s = -s, -s+1, \ldots, s-1, s \longleftarrow (2s+1)$ valeurs de m_s au total

- En partant, par exemple, de l'observation que le niveau 1s de l'atome d'hydrogène se sépare en deux niveaux en présence du champ magnétique, on postule que l'espace des états de spin de l'électron est de dimension 2 soit $2s+1 = 2 \Rightarrow s = \frac{1}{2}$

Notations usuelles :

$|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\rangle = |\alpha\rangle$ et $|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle = |\beta\rangle$

d'où $\hat{S}^2|\alpha\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\alpha\rangle$, $\hat{S}^2|\beta\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\beta\rangle$

$\hat{S}_z|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2}|\alpha\rangle$, $\hat{S}_z|\beta\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\beta\rangle$

- Espace des états de la théorie de Pauli :

on incorpore les états de spin dans la théorie de Schrödinger

$$|\vec{r}\rangle \longrightarrow \underbrace{|\vec{r},\alpha\rangle}_{\substack{\text{électron à la}\\ \text{position } \vec{r} \text{ et dans}\\ \text{l'état de spin } |\alpha\rangle}},\ \underbrace{|\vec{r},\beta\rangle}_{\substack{\text{électron à la}\\ \text{position } \vec{r} \text{ et dans}\\ \text{l'état de spin } |\beta\rangle}}$$

Ainsi $\underbrace{\mathcal{E}_{Pauli}}_{\text{espace des états de l'électron en théorie de Pauli.}} = \{|\vec{r},\sigma\rangle\}_{\vec{r}\in\mathbb{R}^3,\ \sigma=\alpha,\beta}$

Un état quelconque $|\psi\rangle$ s'écrit donc

$$\boxed{|\psi\rangle = \sum_{\sigma=\alpha,\beta}\int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\ \psi(\vec{r},\sigma)\,|\vec{r},\sigma\rangle}$$

On obtient ainsi, dans le cas général, une fonction d'onde à deux <u>composantes</u> qu'on appelle spineur.

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{bmatrix} \psi(\vec{r},\alpha) \\ \psi(\vec{r},\beta) \end{bmatrix}$$

- Revenons à l'atome d'hydrogène : en présence du champ magnétique

$$\hat{H}_0 \longrightarrow \hat{H}_0 + \frac{e}{2m_e} B \hat{L}_z \underbrace{-(\hat{\vec{\mu}}_S \cdot \vec{B})}_{+\frac{e}{m_e} B \hat{S}_z} = \hat{H}$$

$$\hat{H}|\psi^\alpha_{n,l,m}\rangle = \underbrace{\left(\hat{H}_0 + \frac{e}{2m_e} B \hat{L}_z\right)}_{\text{n'agit pas sur l'état de spin}} |\psi^\alpha_{n,l,m}\rangle + \frac{eB}{m_e} \hat{S}_z |\psi^\alpha_{n,l,m}\rangle$$

donne $E_{n,m} |\psi^\alpha_{n,l,m}\rangle + \frac{eB}{m_e} \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\, \psi_{n,l,m}(\vec{r}) \underbrace{\hat{S}_z |\vec{r},\alpha\rangle}_{\frac{\hbar}{2}|\vec{r},\alpha\rangle}$

soit $\boxed{\hat{H}|\psi^\alpha_{n,l,m}\rangle = \left(-\frac{E_I}{n^2} + \frac{m\hbar\omega_0}{2} + \frac{\hbar\omega_0}{2}\right)|\psi^\alpha_{n,l,m}\rangle}$

soit $|\psi^\alpha_{n,l,m}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; \psi_{n,l,m}(\vec{r})\, |\vec{r},\alpha\rangle = \sum_{\sigma=\alpha,\beta} \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; \psi^\alpha_{n,l,m}(\vec{r},\sigma)\, |\vec{r},\sigma\rangle$ $\quad \underset{n,l,m}{\uparrow}$

$|\psi^\beta_{n,l,m}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; \psi_{n,l,m}(\vec{r})\, |\vec{r},\beta\rangle = \sum_{\sigma=\alpha,\beta} \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; \psi^\beta_{n,l,m}(\vec{r},\sigma)\, |\vec{r},\sigma\rangle$ $\quad \underset{n,l,m}{\downarrow}$

avec $\psi^\alpha_{n,l,m}(\vec{r},\sigma) = \begin{cases} \psi_{n,l,m}(\vec{r}) & \text{si } \sigma=\alpha \\ 0 & \text{si } \sigma=\beta \end{cases}$

$\psi^\beta_{n,l,m}(\vec{r},\sigma) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sigma=\alpha \\ \psi_{n,l,m}(\vec{r}) & \text{si } \sigma=\beta \end{cases}$

"Spin-orbitales"

de même $\boxed{\hat{H}|\psi^\beta_{n,l,m}\rangle = \left(-\frac{E_I}{n^2} + \frac{m\hbar\omega_0}{2} - \frac{\hbar\omega_0}{2}\right)|\psi^\beta_{n,l,m}\rangle}$