IMT Atlantique
Bretagne-Pays de la Loire
École Mines-Télécom

Moments cinétiques
TD2

UEE-D
Physique et Applications Quantique
28/10/2022

Exercice 1 : Effet Zeeman normal

Nous nous intéressons dans cet exercice à la levée de dégénérescence des niveaux d'énergies d'une particule dans un potentiel central (type atome d'hydrogène) en présence d'un champ magnétique.

L'atome d'hydrogène est composé d'un électron et d'un proton. Il est possible de séparer l'équation de Schrödinger du centre de masse de l'atome de l'équation de Schrödinger dite radiale qui décrit l'électron :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\Psi(\vec{r}) + V(r)\Psi(\vec{r}) = E_{0n}\Psi(\vec{r})$$

L'étude de l'atome d'hydrogène se résume alors à la résolution de cette équation portant sur son électron, où $V(r)$ est le potentiel Coulombien : $V(r) = \frac{-e^2}{r}$ avec *r* la distance proton-électron, $e^2 = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}$, $m_e = 9.1\ 10^{-31}$ kg la masse de l'électron supposée très petite devant celle du proton, $q = 1.6\ 10^{-19}$ C la charge élémentaire, $\varepsilon_0 = 8.85\ 10^{-12}\ \mathrm{F.m^{-1}}$ la permittivité du vide, et $\hbar = 1.054\,571\,818\ 10^{-34}\ \mathrm{J\,s}$ est la constante de Planck réduite.

On montre que dans le cas d'une particule soumis à un potentiel central, le Laplacien en coordonnées sphériques peut s'écrire :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{L^2}{2\hbar^2 r^2},$$

où $L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$ est l'opérateur associé au moment cinétique orbital.

0) Ecrire le Hamiltonien de l'électron de l'atome d'hydrogène $\widehat{H_0}$ sans champ appliqué, et montrer qu'il commute avec $\widehat{L^2}$ et $\widehat{L_z}$.

Correction : Par définition : $\hat{P}_r = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\vec{r}}{r}\right).\hat{\vec{P}} + \hat{\vec{P}}.\left(\frac{\vec{r}}{r}\right)\right] = -i\,\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) = -i\,\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r$

L'hamiltonien s'écrit : $\hat{H}_0 = V(r) - \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{2m_e r^2} = \frac{-e^2}{r} + \frac{1}{2m_e}\hat{P}_r^{\,2} + \frac{1}{2m_e r^2}\hat{L}^2.$

L'Hamiltonien est composé du terme de potentiel Coulombien ($\frac{-e^2}{r}$), d'un terme radial d'énergie cinétique (e.g. translation, $\frac{1}{2m_e}\hat{P}_r^{\,2}$), et d'un terme d'énergie cinétique de rotation ($\frac{1}{2m_e r^2}\hat{L}^2$). Comme $\hat{L}^2$ ne dépend pas de r, il commute avec V(r) et aussi avec le terme radial d'énergie cinétique, et donc, $\hat{L}^2$ commute avec $\hat{H}_0$.

De même, $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$ ne dépend pas de r et commute avec $\hat{L}^2$.

Conclusion : les trois opérateurs $\widehat{H}_0$, $\widehat{L_z}$ et $\hat{L}^2$ commutent entre eux :

$$[\widehat{H}_0, \hat{L}^2] = [\widehat{H}_0, \widehat{L_z}] = 0$$

Les opérateurs $\widehat{H_0}$, $\widehat{L^2}$ et $\widehat{L_z}$ ont donc une base commune de vecteurs propres. On montre que les niveaux d'énergies de l'électron sont quantifiés selon $E_{0n} = \frac{E_r}{n^2}$ où $E_r = \frac{e^2}{2a_0} = 13.6eV$ et la constante de Rydberg, $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529\text{Å}$ est le rayon de Bohr, et n est le nombre quantique principal.

On considère maintenant que l'atome est en présence d'un champ magnétique uniforme $\vec{B} = B\vec{z}$. On ne considère pas le spin de l'électron pour le moment. Le Hamiltonien de l'électron en présence du champ s'écrit :

$$\widehat{H} = \widehat{H_0} + \frac{B\mu_B}{\hbar}\widehat{L_z}$$

où $\mu_B = \frac{q\hbar}{2m_e} = 9.274\ \ 10^{-24}\ \ \mathrm{JT}^{-1}$ est le magnéton de Bohr.

1) Montrer que $\widehat{H}$ commute avec $\widehat{L_z}$. On note $|nlm>$ leur base de vecteurs propres communs.

Correction : $\widehat{L_z}$ commute avec $\widehat{H_0}$ et commute avec lui-même (pour le terme Zeeman). Donc $[\widehat{H}, \widehat{L_z}] = 0$

2) Donner les valeurs propres de $\widehat{H}$ notées $E_{n,m}$.

Correction : $E_{n,l,m} = \langle nlm|\,\widehat{H}|nlm\rangle = \langle nlm|\,\widehat{H}_0|nlm\rangle + \frac{B\mu_B}{\hbar}\langle nlm|\,\hat{L}_z|nlm\rangle$

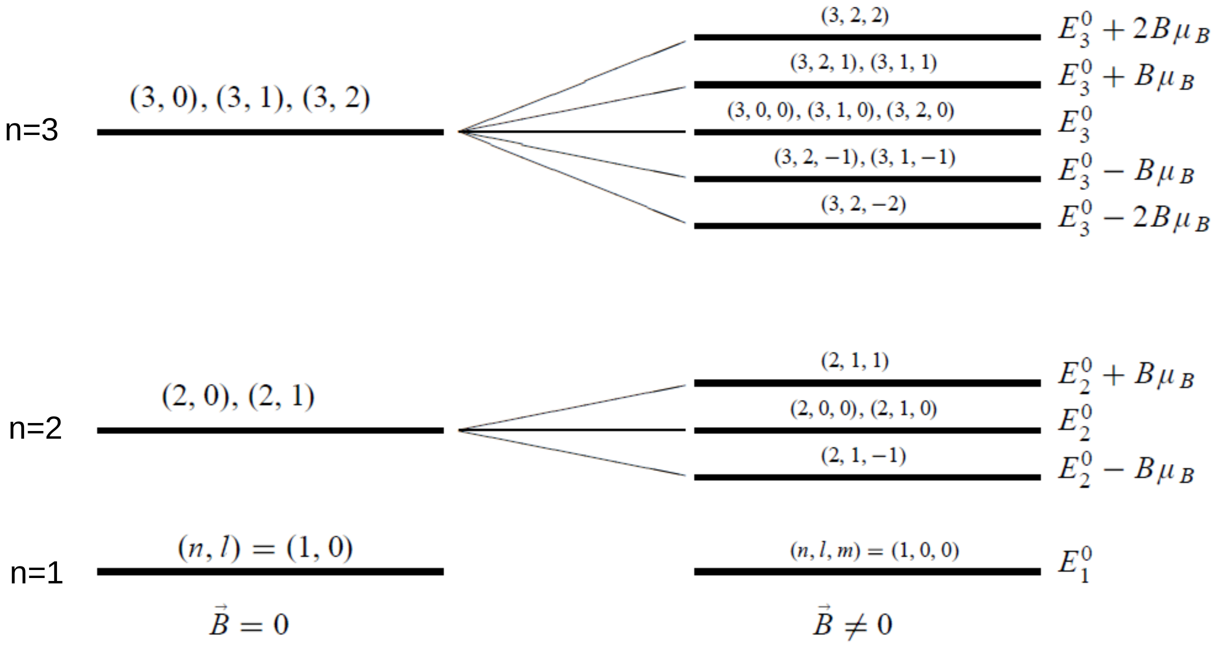
Le terme en $\widehat{H_0}$ donne simplement les E_n et le terme Zeeman est donné directement par la valeur propre de $\widehat{L_z}$ qui est vue en cours :

$$E_{n,l,m} = \frac{E_{n,l}}{n^2} + m\mu_B B$$

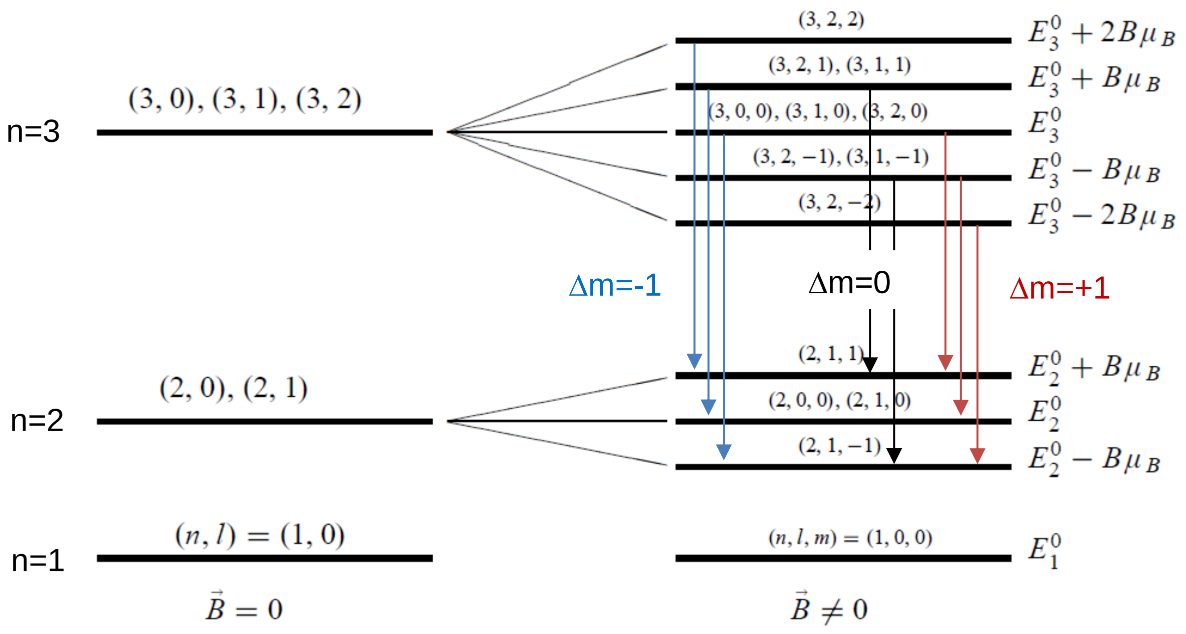
3) Placer sur un diagramme de niveaux d'énergie les états $|nlm>$ pour n = 1, 2, 3. Vérifier numériquement l'hypothèse $\mu_B B \ll E_r$ pour des champs réalisables expérimentalement. Quels sont les états qui restent dégénérés malgré l'application d'un champ $\vec{B}$? A quel degré ?

Correction : les niveaux qui restent dégénérés sous l'application d'un champ sont ceux ayant la même valeur de m. Pour n=2, les états $|200\rangle$ et $|210\rangle$ sont doublement dégénérés.
Pour n=3, les états $|321\rangle$ et $|311\rangle$ sont doublement dégénérés, de même pour $|32-1\rangle$ et $|31-1\rangle$, et les états $|300\rangle$, $|310\rangle$, $|320\rangle$ sont triplement dégénérés.

Pour un champ de 1T, le splitting Zeeman est de l'ordre de $\mu_B B = 5.8\,10^{-5}\ eV$,
tandis que les écarts entre niveaux n sont de l'ordre de la constante de Rydberg.



4) Les transitions d'un état $|nlm>$ vers un autre $|n'l'm'>$ doivent être conforme à la conservation du moment cinétique total. Cela donne dans ce cas de figure les règles de sélection suivantes : $m' - m = -1{,}0{,}1$, $l' - l = -1{,}1$, et les transitions $m = 0 \longrightarrow m' = 0$ sont interdites. Dessiner sur le diagramme d'énergies les transitions possibles et commenter le fait que les transitions $m = 0 \longrightarrow m' = 0$ ne soient pas permises.



La transition $m = 0 \longrightarrow m' = 0$ n'est pas permise dû au fait que le spin du photon vaut 1, et qu'on doit toujours avoir conservation du moment cinétique totale du système {électron+photon}.

5) On veut exciter un atome d'hydrogène de l'état $|2{,}1{,}1>$ vers $|3{,}2{,}2>$ placé dans un champ magnétique $B = 1.4$ T. A quelle fréquence doit émettre notre antenne ?

Correction : Une transition entre les états $|2{,}1{,}1>$ et $|3{,}2{,}2>$ correspond à une variation d'énergie $\Delta E = E_{322} - E_{211} = E_r\left(\frac{1}{9} - \frac{1}{4}\right) + \mu_B B = (1.888888 + 0.0000812)\ eV = 1.8889708\ eV$.
La fréquence des photons qui excitent cette transition doit être :
$f = \frac{\Delta E}{2\pi\hbar} = 456.751\ THz$ ce qui correspond à une longueur d'onde $\lambda = 656.81\ nm$ (couleur rouge).

6) Les expériences montrent en réalité que chaque niveau d'énergie est séparé sous l'effet d'un champ en un nombre pair de niveaux, aussi appelé effet Zeeman anormal. Justifier cette levée de dégénérescence en nombre pair de niveaux.

Correction : Nous n'avons pas considéré le moment cinétique de spin de l'électron qui va créer un moment angulaire total de valeur demi-entière. Par conséquent, on aura nombre pair de niveaux, et donc un nombre pair de raies.
Historiquement, l'effet Zeeman était connu avant la connaissance du spin, et les premières observations étaient sur des atomes de moment cinétique de spin nul (e.g. raies spectrales Cd, Hg). C'est un peu pour cette raison que les cas de « splitting » en nombre pair de niveaux ont été appelé effet Zeeman « anormal ».

Exercice 2 : Addition de deux moments cinétiques

On considère deux particules de moment cinétique $j_1 = j_2 = 1$. On note j le moment cinétique du système total.

1) Quelle sont les valeurs possibles pour j.
0,1,2. On rappelle la formule du cours.

2) On fixe j = 2. Ecrire l'état $|2{,}2>$ en fonction des $|\boldsymbol{j_1}, \boldsymbol{m_1}\rangle\,|\boldsymbol{j_2}, \boldsymbol{m_2}\rangle$. Quel est le coefficient de Clebsch-Gordan associé ?
Il n'y a qu'un seul état possible : $|\boldsymbol{j_1} = \mathbf{1}, \boldsymbol{m_1} = \mathbf{1}\rangle\,|\boldsymbol{j_2} = \mathbf{1}, \boldsymbol{m_2} = \mathbf{1}\rangle$.

3) Ecrire les états $|2{,}1>$ et $|2{,}0>$ en fonction des $|\boldsymbol{j_1}, \boldsymbol{m_1}\rangle\,|\boldsymbol{j_2}, \boldsymbol{m_2}\rangle$.

$$|\mathbf{2}, \mathbf{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\mathbf{1}, \mathbf{1} > |\mathbf{1}, \mathbf{0}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\mathbf{1}, \mathbf{0} > |\mathbf{0}, \mathbf{1}\rangle$$

$$|\mathbf{2}, \mathbf{0}\rangle = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{6}}}|\mathbf{1}, \mathbf{1} > |\mathbf{1}, -\mathbf{1}\rangle + \sqrt{\frac{\mathbf{2}}{\mathbf{3}}}|\mathbf{1}, \mathbf{0} > |\mathbf{1}, \mathbf{0}\rangle + \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{6}}}|\mathbf{1}, -\mathbf{1} > |\mathbf{1}, \ \mathbf{1}\rangle$$

4) Facultatif : même calcul pour j=1 et j=0

Coefficients de Clebsch-Gordon