M1 PGA & SDUEE — Année 2007–08

Physique quantique appliquée

Travaux dirigés n°10 : Structure hyperfine de l'atome d'Hydrogène en présence d'un champ magnétique extérieur

Corrigé

En plus du couplage spin-orbite $\overrightarrow{L}.\overrightarrow{S}$ et des autres corrections relativistes, existe un couplage entre le spin électronique $\overrightarrow{S}$ d'un atome et son spin d'origine nucléaire $\overrightarrow{I}$. L'Hamiltonien d'interaction s'écrit

$$H_1 = \frac{A}{\hbar^2}\overrightarrow{S}.\overrightarrow{I}$$

avec $A = 5,87.10^{-6}$ eV, et conduit à une structuration "hyperfine" des niveaux énergétiques E_{0nLS} d'un atome multiélectronique.
On considère par la suite un atome d'Hydrogène dans son état fondamental $1s$ ($n = 1$, $L = 0$) dont l'énergie est notée simplement E_0.

1 - Quel est le degré de dégénérescence de E_0 si on néglige H_1 ? (on rappelle que le spin du proton vaut $I = 1/2$)

R : A cause des états de spin ($\overrightarrow{S}$ et $\overrightarrow{I}$), la dégénérescence de l'état $1s$ est 4 (système à 4 états).

2 - Structure hyperfine Comment se simplifie l'expression $\overrightarrow{J} = \overrightarrow{L} + \overrightarrow{S}$ pour l'état $1s$?
R : $L = 0$ (et donc $m_L = 0$) implique que $\overrightarrow{J} = \overrightarrow{S}$ pour l'état $1s$.

Construire la base standard $|F, m_F\rangle$ de l'opérateur moment cinétique total $\overrightarrow{F} = \overrightarrow{J} + \overrightarrow{I}$ à partir des vecteurs de la base composée de $\overrightarrow{S}$ et $\overrightarrow{I}$ (aide : $|1,0\rangle = (|+-\rangle + |-+\rangle)/\sqrt{2}$).
R : $J = S = 1/2$ et $I = 1/2$, donc $F = 0$ ou 1. La base standard $|F, m_F\rangle$ se construit à partir de la base composée $|S, m_S; I, m_I\rangle = |S, m_S\rangle \otimes |I, m_I\rangle$, notée plus simplement $|m_S, m_I\rangle$ ou encore $|\varepsilon_S, \varepsilon_I\rangle$ avec $\varepsilon = \pm$. La relation $m_F = m_S + m_I$ conduit d'abord à :

$$|1,1\rangle = |++\rangle \quad \text{et} \quad |1,-1\rangle = |--\rangle$$

On construit ensuite $|1,0\rangle$ à partir d'un de ces vecteurs grâce aux opérateurs $F^{\pm}$, et on obtient finalement $|0,0\rangle$ en exigeant qu'il soit orthogonal à $|1,0\rangle$ et normé à 1. Ici, le vecteur $|1,0\rangle$ est donné. On obtient donc simplement :

$$|0,0\rangle = \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}}$$

Donner ensuite l'effet de H_1 sur les niveaux énergétiques correspondants. La dégénérescence de la question 1. est-elle levée ?
R : $H_1 = \frac{A}{2\hbar^2}\left(\overrightarrow{F}^2 - \overrightarrow{S}^2 - \overrightarrow{I}^2\right)$ donc :

$$H_1 |F, m_F\rangle = \frac{A}{2}\left(F(F+1) - S(S+1) - I(I+1)\right)|F, m_F\rangle$$

Les valeurs propres ne dépendent que de F et pas de m_F, et valent :

$$F = 0 : \qquad -\frac{3A}{4}$$

$$F = 1 : \qquad + \frac{A}{4}$$

La dégénérescence d'ordre 4 est donc partiellement levée par H_1 : Le niveau $F = 1$ est dégénéré d'ordre 3 et est appelé "état triplet". Le niveau $F = 0$ n'est pas dégénéré et est donc appelé "état singulet"

AN : Donner la longueur d'onde associée à l'écart énergétique entre l'état "triplet" et l'état "singulet". Sachant que le milieu interstellaire est composé principalement d'Hydrogène atomique et que la température des nuages interstellaires est suffisante pour induire des transitions entre les 2 états hyperfins $F = 1$ et $F = 0$, conclure sur l'importance de la "raie à 21 cm de l'Hydrogène" en astrophysique.
R : $A = 5,87.10^{-6}$ eV, donc $\nu = A/h = 1417$ MHz puis $\lambda = c/\nu \simeq 21$ cm. Multiples applications (+ la plaque des sondes Voyager et Pioneer ci-dessous)

3 - Champ magnétique extérieur On place cet atome d'Hydrogène - dans son état fondamental $1s$ - dans un champ magnétique extérieur $\overrightarrow{B}$.
Exprimer l'Hamiltonien de "couplage magnétique" H_B en fonction des moments magnétiques orbital $\overrightarrow{M_L}$, de spin électronique $\overrightarrow{M_S}$ et de spin nucléaire $\overrightarrow{M_I}$; puis en fonction de $\overrightarrow{L}$, $\overrightarrow{S}$ et $\overrightarrow{I}$ et de $\omega_0 = -\frac{q}{2m_e}B$ et $\omega_N = \frac{q}{2m_p}g_pB$, où g_p est le facteur de Landé nucléaire du proton ($g_p = 5,58$).
R :

$$H_B = -\overrightarrow{M}.\overrightarrow{B}$$

avec :

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{M} &= \overrightarrow{M_L} + \overrightarrow{M_S} + \overrightarrow{M_I} \\
&= g_L \frac{q}{2m_e}\overrightarrow{L} + g_S\frac{q}{2m_e}\overrightarrow{S} - g_p\frac{q}{2m_p}\overrightarrow{I}
\end{aligned}$$

($g_L = 1$ et $g_S = 2$), d'où, pour $\overrightarrow{B} = B\overrightarrow{e_z}$:

$$\begin{aligned}
H_B &= -M_zB = \omega_0\,(L_z + 2S_z) + \omega_N I_z \\
&= \omega_0\left(L_z + 2S_z + \frac{\omega_N}{\omega_0}I_z\right)
\end{aligned}$$

Quel est l'effet du terme dépendant de $\overrightarrow{L}$ dans le cas présent ? De même, que déduisez vous du rapport ω_N/ω_0 pour l'expression de H_B ?
R : Pour la même raison qu'au-dessus, la seule valeur propre de L_z est 0, et L_z n'a donc aucun effet dans H_B (on peut l'enlever). Quant à ω_N/ω_0, il est égal à $-\frac{m_e}{m_p}g_p$ de valeur absolue très inférieure à 1 du fait du rapport m_e/m_p. Finalement, on a :

$$H_B \sim 2\omega_0 S_z$$

4 - Effet Zeeman On suppose que l'intensité du champ magnétique $\overrightarrow{B}$ est faible de telle sorte que H_B puisse être considéré comme une perturbation de l'Hamiltonien H_1.
Donner les corrections aux niveaux énergétiques obtenus à la question 2. de 2 façons différentes :
4.1) en s'aidant des vecteurs de la base standard $|F, m_F\rangle$ établis à la question 2.
R : Les corrections aux niveaux énergétiques s'obtiennent : soit en prenant la valeur moyenne de la perturbation dans les états associés lorsque ceux-ci ne sont pas dégénérés :

$$\langle F, m_F|\, H_B\, |F, m_F\rangle = 2\omega_0\,\langle F, m_F|\, S_z\, |F, m_F\rangle$$

soit en diagonalisant la matrice de perturbation dans l'espace des états dégénérés :

$$\text{diagonaliser} \quad \overline{H_B} \quad \text{dans la base } |F, m_F\rangle$$

Dans notre cas, il faut donc calculer :

$$\langle 0, 0|\, H_B\, |0, 0\rangle$$

pour trouver la correction au niveau $F = 0$, et diagonaliser la matrice de $\overline{H_B}$ dans la base $|1, m_F\rangle$ pour trouver les corrections au niveau $F = 1$
Or :

$$S_z\,|1, 1\rangle = S_z\,|{+}{+}\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|{+}{+}\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|1, 1\rangle$$

$$S_z\,|1,-1\rangle = S_z\,|--\rangle = -\frac{\hbar}{2}\,|--\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|1,-1\rangle$$

$$\begin{aligned} S_z\,|1,0\rangle &= S_z\left(|+-\rangle + |-+\rangle\right)/\sqrt{2} \\ &= \frac{\hbar}{2}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right)/\sqrt{2} \\ &= \frac{\hbar}{2}\,|0,0\rangle \end{aligned}$$

$$S_z\,|0,0\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|1,0\rangle$$

D'où :

$$\langle 0,0|\, H_B\, |0,0\rangle = 0$$

et :

$$\overline{H_B} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_0 & 0 & 0 \\ 0 & -\hbar\omega_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

où les vecteurs de base ont été rangés dans l'ordre suivant : $|1,1\rangle$, $|1,-1\rangle$, $|1,0\rangle$.
Cette matrice est déjà diagonale. On lit alors les corrections énergétiques des états $|1,1\rangle$, $|1,-1\rangle$, $|1,0\rangle$ sur la diagonale.

4.2) en utilisant le théorème de Wigner-Eckart pour exprimer S_z en fonction de F_z.
R : Dans chaque ε_F, on a $\overrightarrow{S} = \alpha_F \overrightarrow{F}$ avec α_F obtenu par la méthode usuelle ($\alpha_F = \langle F, m_F|\, \overrightarrow{S}.\overrightarrow{F}\, |F, m_F\rangle \,/\, \langle F, m_F|\, \overrightarrow{F}^2\, |F, m$
et $\overrightarrow{S}.\overrightarrow{F} = \left(\overrightarrow{F}^2 + \overrightarrow{S}^2 - \overrightarrow{I}^2\right)/2$) :

$$\begin{aligned} \alpha_F &= \frac{1}{2} + \frac{S(S+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} \quad \text{pour} \quad F \neq 0 \\ &= \frac{1}{2} \quad \text{car} \quad S = I = 1/2 \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned} \langle F, m_F|\, H_B\, |F, m_F\rangle &= 2\omega_0 \langle F, m_F|\, S_z\, |F, m_F\rangle \\ &= 2\omega_0 \alpha_F \langle F, m_F|\, F_z\, |F, m_F\rangle \\ &= 2\omega_0 \alpha_F m_F \hbar \end{aligned}$$

Pour $F = 0$, on a simplement 0 :

$$\langle 0,0|\, H_B\, |0,0\rangle = 0$$

et pour $F = 1$, on a :

$$\langle 1, m_F'|\, H_B\, |1, m_F\rangle = \hbar\omega_0 m_F \delta_{m_F' m_F}$$

(matrice diagonale), et on retrouve les mêmes résultats qu'au dessus, à savoir que la dégénérescence du niveau $F = 1$ est levée.

Y-a-t-il levée de dégénérescence ? OUI
Tracer l'allure des courbes représentant les niveaux d'énergie en fonction de ω_0.

$$\begin{aligned} E_{11}^{0+1} &= \frac{A}{4} + \hbar\omega_0 \\ E_{1-1}^{0+1} &= \frac{A}{4} - \hbar\omega_0 \\ E_{10}^{0+1} &= \frac{A}{4} \\ E_{00}^{0+1} &= -\frac{3A}{4} \end{aligned}$$

Facultatif : Le niveau $F = 0$ est-il dégénéré ? NON Est-il déplacé par le champ $\overrightarrow{B}$? NON

Donner l'effet Zeeman du second ordre pour le niveau $F = 0$.

$$\begin{aligned}
E_{00}^{0+1+2} &= -\frac{3A}{4} + \sum_{m_F} \frac{|\langle 0,0| H_B |1,m_F\rangle|^2}{E_{00}^0 - E_{1m_F}^0} \\
&= -\frac{3A}{4} + \frac{|\langle 0,0| H_B |1,0\rangle|^2}{E_{00}^0 - E_{10}^0} \\
&= -\frac{3A}{4} - \frac{(\hbar\omega_0)^2}{A}
\end{aligned}$$

Dans le cas général, si le niveau $F = 0$ est le niveau fondamental de l'atome, quel est le signe du déplacement énergétique du second ordre ? Négatif car E_{00}^0 est inférieure aux autres énergies dans la formule de l'effet Zeeman du second ordre. C'est une propriété générale.

5 - Effet Paschen-Back On suppose maintenant le cas opposé, i.e. que l'intensité du champ magnétique $\overrightarrow{B}$ est suffisamment forte pour que H_1 puisse être considéré comme une perturbation de l'Hamiltonien H_B. Quels sont les vecteurs propres et les valeurs propres de H_B ? Y-a-t-il dégénérescence ?
R : Les vecteurs propres de $H_B = 2\omega_0 S_z$ sont les vecteurs $|S, m_S; I, m_I\rangle = |S, m_S\rangle \otimes |I, m_I\rangle$, notés $|\varepsilon_S, \varepsilon_I\rangle$. Les valeurs propres associées sont :

$$\begin{aligned}
&\hbar\omega_0 \quad \text{pour} \quad \text{les 2 vecteurs} \quad |+, \varepsilon_I\rangle \\
&-\hbar\omega_0 \quad \text{pour} \quad \text{les 2 vecteurs} \quad |-, \varepsilon_I\rangle
\end{aligned}$$

Elles sont dégénérées d'ordre 2.

Traiter H_1 en perturbation et montrer que la correction au premier ordre est proportionnelle à $m_I.m_S$.
La dégénérescence est-elle levée ?
Tracer l'allure des courbes représentant les niveaux d'énergie en fonction de ω_0.
R :

$$\begin{aligned}
H_1 &= \frac{A}{\hbar^2} \overrightarrow{S}.\overrightarrow{I} \\
&= \frac{A}{\hbar^2} \left[S_z I_z + \frac{S_+ I_- + S_- I+}{2} \right]
\end{aligned}$$

donc :

$$\langle \varepsilon_S, \varepsilon_I'| H_1 |\varepsilon_S, \varepsilon_I\rangle = A m_I.m_S \delta_{m_I' m_I}$$

La matrice de H_1 est donc diagonale dans chacune des 2 bases $\{|++\rangle, |+-\rangle\}$ et $\{|-+\rangle, |--\rangle\}$. On lit donc les corrections énergétiques sur la diagonale de ces matrices, i.e. :

$$\begin{aligned}
E_{++}^{0+1} &= \hbar\omega_0 + \frac{A}{4} \\
E_{+-}^{0+1} &= \hbar\omega_0 - \frac{A}{4} \\
E_{-+}^{0+1} &= -\hbar\omega_0 - \frac{A}{4} \\
E_{--}^{0+1} &= -\hbar\omega_0 + \frac{A}{4}
\end{aligned}$$

La dégénérescence est donc levée.

6 - *Facultatif :* Cas intermédiaire où les effets de H_B et H_1 sont du même ordre En utilisant l'expression des vecteurs de la base standard $|F, m_F\rangle$ de la question 2., donner la matrice représentant $H_B + H_1$ dans la base $|F, m_F\rangle$. En déduire les vecteurs propres et énergies propres du système lorsque le champ $\overrightarrow{B}$ est quelconque.
R : En utilisant les résultats de la question 4, on obtient, dans la base $|F, m_F\rangle$:

$$\overline{H_B + H_1} = \begin{pmatrix}
\frac{A}{4} + \hbar\omega_0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{A}{4} - \hbar\omega_0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \frac{A}{4} & \hbar\omega_0 \\
0 & 0 & \hbar\omega_0 & -\frac{3A}{4}
\end{pmatrix}$$

où les vecteurs de base ont été rangés dans l'ordre suivant : $|1,1\rangle$, $|1,-1\rangle$, $|1,0\rangle$, $|0,0\rangle$.
Les 4 valeurs propres sont alors :

$$
\begin{aligned}
E_1 &= \frac{A}{4} + \hbar\omega_0 \\
E_2 &= \frac{A}{4} - \hbar\omega_0 \\
E_3 &= -\frac{A}{4} + \sqrt{\left(\frac{A}{2}\right)^2 + \hbar^2\omega_0^2} \\
E_3 &= -\frac{A}{4} - \sqrt{\left(\frac{A}{2}\right)^2 + \hbar^2\omega_0^2}
\end{aligned}
$$

et les vecteurs propres associés sont :

$$
\begin{aligned}
&|1,1\rangle \\
&|1,-1\rangle \\
&\cos\theta * |1,0\rangle + \sin\theta * |0,0\rangle \\
&\cos\varphi * |1,0\rangle + \sin\varphi * |0,0\rangle
\end{aligned}
$$

avec :

$$
\begin{aligned}
\tan\theta &= \left(-\frac{A}{2} + \sqrt{\left(\frac{A}{2}\right)^2 + \hbar^2\omega_0^2}\right) / \hbar\omega_0 \\
\tan\varphi &= \left(-\frac{A}{2} - \sqrt{\left(\frac{A}{2}\right)^2 + \hbar^2\omega_0^2}\right) / \hbar\omega_0
\end{aligned}
$$

Tracer l'allure des courbes représentant les niveaux d'énergie en fonction de ω_0, et retrouver les résultats des questions 4. et 5. pour $\omega_0 \longrightarrow 0$ et $\omega_0 \longrightarrow +\infty$.

Quel est, selon vous, l'intérêt de ces effets en astrophysique pour l'étude des nuages interstellaires ?
R : Le clivage des raies de l'Hydrogène permet de mesurer la valeur du champ magnétique qui règne dans les nuages interstellaires.