

TD n°6 : Moment cinétique

1 Quantification sur un anneau

Nous allons nous intéresser à la dynamique d'une particule sur un anneau, ce qui permettra d'établir la connexion entre la quantification du moment cinétique orbital en deux dimensions et les problèmes unidimensionnels étudiés au début du cours.

On considère une particule de masse M , effectuant un mouvement de rotation dans le plan xOy à distance de l'origine r fixée, et animée d'une impulsion $\vec{p} = p_\varphi \vec{u}_\varphi$ où $\vec{u}_\varphi = -\sin \varphi \vec{u}_x + \cos \varphi \vec{u}_y$ (notons que p_φ est positif ou négatif). Le confinement dans le plan ($z = 0$) et la direction radiale ($r = \text{cste}$) résulte d'un potentiel.

On décrit d'abord le problème classiquement :

1. Faire un schéma de la situation et donner l'énergie cinétique de la particule en fonction de p_φ et M .
2. Exprimer le moment angulaire ℓ_z en fonction de p_φ et r . Analyser son signe.
3. Réécrire l'énergie cinétique comme une énergie cinétique de rotation $\frac{\ell_z^2}{2I}$ en faisant apparaître le moment d'inertie I que l'on exprimera en fonction de M et r .

On introduit maintenant des éléments de mécanique quantique. On note λ la longueur d'onde caractérisant la particule.

1. Rappeler la relation de de Broglie.
2. À cause du confinement radiale, la fonction d'onde $\psi(\varphi)$ dépend uniquement de l'angle azimutal φ . Quelle propriété doit vérifier la fonction d'onde $\psi(\varphi)$?
3. Puisque $s = r\varphi$ est l'abscisse curviligne, on cherche une solution en onde plane du type $\psi(\varphi) = A e^{iks} = A e^{ikr\varphi}$ où k le vecteur d'onde. Quelle est la condition de quantification sur k ? On pourra introduire un entier m .
4. Dédire que les valeurs possibles de ℓ_z sont de la forme $\pm \hbar m$. Discuter la quantification de l'énergie cinétique de rotation.

2 Spectre de rotation de la molécule di-césium

Dans certaines conditions, une molécule diatomique peut être considérée comme un bâton rigide en rotation caractérisé, dans son centre de masse, par une énergie cinétique de rotation

$$H_{\text{rot}} = \frac{\vec{\ell}^2}{2I} \quad (1)$$

où $\vec{\ell}$ est l'opérateur de moment cinétique orbital décrivant la rotation de la molécule et $I = MR^2$ un moment d'inertie.

1/ Quel est le spectre des états stationnaires et les valeurs propres de l'énergie, notée E_ℓ ? Discuter les dégénérescences.

2/ Quelle est la distance entre deux niveaux successifs $E_\ell - E_{\ell-1}$? Comparer au spectre de la figure 1, obtenu en étudiant un gaz ultrafroid ($T \sim 0.3$ mK) de molécules de di-Césium ionisées.

3/ Le Césium est $^{133}_{55}\text{Cs}$. Déduire la masse M intervenant dans I (on donne $m_{\text{proton}} \simeq 1.67 \times 10^{-27}$ kg). La figure représente deux spectres de rotation associés à deux états de la molécule, indicés par un autre nombre quantique (noté n). Sans calcul : dans quel état la distance R entre atomes est-elle la plus grande? En utilisant les données de la figure, calculer numériquement la distance R . Commenter.

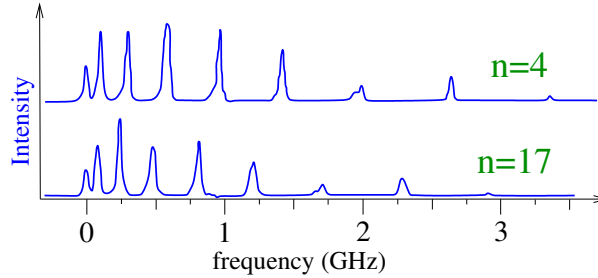


FIGURE 1 : *Spectre rotationnel de la molécule Cs_2 ionisée*. Données tirées de la référence : A. Fioretti *et al*, « Photoassociative spectroscopy of the Cs_2O_g^- long-range state », The European Physical Journal D **5**, 389 (1999).

3 Moment cinétique orbital des atomes et effet Zeeman

L'hamiltonien décrivant la dynamique d'une particule soumise à un champ magnétique est de la forme

$$H_B = \frac{1}{2M} \left(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + V(\vec{r}) \quad (2)$$

où $\vec{A}(\vec{r}) = (1/2)\vec{B} \times \vec{r}$ décrit un champ magnétique uniforme. Si cette particule est *un* électron dans un atome, $V(\vec{r}) \rightarrow V(r)$ est un potentiel électrostatique (à symétrie sphérique).

1/ À l'approximation linéaire en \vec{B} , montrer que l'hamiltonien devient

$$H_B \simeq H_0 - \frac{q}{2M} \vec{B} \cdot \vec{\ell} \quad (3)$$

où $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$ est l'opérateur de moment cinétique orbital. Nous pouvons donc écrire le terme de couplage au champ magnétique sous la forme

$$H_Z = -\vec{B} \cdot \vec{\mathcal{M}}_{\text{orb}} \quad \text{où} \quad \vec{\mathcal{M}}_{\text{orb}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{q}{2M} \vec{\ell} \quad (4)$$

est le moment magnétique (aimantation) induit par le mouvement de rotation de l'électron dans l'atome. Le facteur gyromagnétique orbital est donc $\gamma_{\text{orb}} = q/(2M)$

2/ Dans la même approximation, l'hamiltonien d'un atome avec Z électrons a la même structure, $H_{\text{atome}} \simeq H_0 - \vec{\mathcal{B}} \cdot \vec{\mathcal{M}}_{\text{orb}}$, mais fait intervenir le moment cinétique total des Z électrons $\vec{L} = \sum_{i=1}^Z \vec{\ell}_i$. Justifier (physiquement) que H_0 commute avec \vec{L} . Dédurre une dégénérescence des niveaux d'énergie.

3/ Comment les niveaux d'énergie de H_{atome} dépendent-ils de \mathcal{B} ? Tracer l'allure des sous-niveaux pour un L donné en fonction de \mathcal{B} .

4/ **Règles de sélection.**— Toutes les transitions entre niveaux d'énergie d'un atome ne sont pas autorisées mais doivent satisfaire certaines *règles de sélection*. Par exemple, les transitions *dipolaires électriques* (les plus probables *a priori*) sont possibles entre deux niveaux si $\Delta\ell = \ell' - \ell = \pm 1$ et $\Delta m = +1, 0, -1$.

Dessiner toutes les transitions dipolaires électriques possibles entre les sous-niveaux Zeeman de deux niveaux caractérisés par les nombres quantiques $\ell = 1$ et $\ell' = 2$.

Commenter la figure 2.

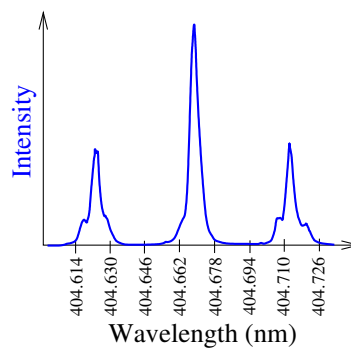


FIGURE 2 : *Spectre Zeeman (intensité lumineuse absorbée en fonction de la longueur d'onde) pour une vapeur d'atomes de mercure soumise à un champ magnétique $\mathcal{B} = 29$ kGauss (transition $7^3S_1 \rightarrow 6^3P_0$).*

5/ Le spectre Zeeman du Sodium est représenté sur la figure 3. Est-ce compatible avec la discussion précédente? Comment expliquer la différence avec le cas du mercure ($^{200}_{80}\text{Hg}$ alors que le sodium est un alcalin, $^{23}_{11}\text{Na}$)? Que peut-on conclure sur le moment cinétique total dans l'atome? Quel terme a-t-il été oublié dans $H_{\mathcal{B}}$ (et H_Z)?

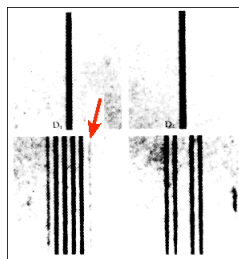


FIGURE 3 : *En bas : spectre Zeeman de l'atome de sodium (la flèche indique une raie peu visible).*

4 Moment cinétique orbital et opérateurs vectoriels

On note \vec{r} et \vec{p} les opérateurs position et impulsion d'une particule et $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$ son moment cinétique orbital. On rappelle les relations de commutation canoniques : $[r_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$.

1/ Vérifier que les composantes de $\vec{\ell}$ satisfont les relations de commutation définissant un moment cinétique.

Indication : on rappelle $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$.

2/ Calculer $[\ell_z, x]$, $[\ell_z, y]$, $[\ell_z, z]$. Commenter.

3/ Déduire $[\ell_z, \vec{r}^2]$.

5 Harmoniques sphériques

Les harmoniques sphériques $Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | \ell, m \rangle$ sont les fonctions d'onde états propres des opérateurs $\vec{\ell}^2$ et ℓ_z . Il est commode d'introduire

$$C_\ell^m = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_\ell^m \quad (5)$$

Exprimée en fonction des coordonnées cartésiennes sur la sphère, $x = \cos \varphi \sin \theta$, $y = \sin \varphi \sin \theta$ et $z = \cos \theta$, les premières harmoniques prennent la forme

$$C_0^0 = 1 \quad (6)$$

$$C_1^0 = z, \quad C_1^{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(x \pm iy) \quad (7)$$

$$C_2^0 = \frac{1}{2}(3z^2 - 1), \quad C_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{2}}(x \pm iy)z, \quad C_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{3}{8}}(x^2 - y^2 \pm 2ixy) \quad (8)$$

1/ Pour $\vec{r} \rightarrow 0$, la fonction $f(\vec{r})$ admet le développement

$$f(\vec{r}) = a_0 + a_1(\sqrt{2}x + iz) + a_2xz + \dots \quad (9)$$

Écrire le développement en terme des harmoniques sphériques, i.e. $f(\vec{r}) = \sum_\ell f_\ell(r) \sum_m A_{\ell,m} Y_\ell^m(\theta, \varphi)$.

2/ Quel est le rapport avec la mécanique quantique ?

Annexe : principales propriétés utiles

Un moment cinétique $\hat{J} = \hat{J}_x \vec{u}_x + \hat{J}_y \vec{u}_y + \hat{J}_z \vec{u}_z$ est un opérateur vectoriel dont les composantes satisfont des relations de commutations :

$$[J_x, J_x] = 0, \quad [J_x, J_y] = i\hbar J_z, \quad [J_x, J_z] = -i\hbar J_y, \dots$$

etc (les autres sont obtenues par permutations circulaires des trois indices). Les états propres de \vec{J}^2 et J_z sont notés $\{|j, m\rangle\}$ où les deux nombres quantiques correspondent aux valeurs propres de \vec{J}^2 et J_z

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle && \text{avec } j = 0, 1, 2, \dots \text{ OU } j = 1/2, 3/2, \dots \\ J_z |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle && \text{avec } m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \\ J_\pm |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle \end{aligned}$$

6 Grand moment cinétique

Soit \vec{J} un moment cinétique. Considérons les $2j + 1$ états propres de \vec{J}^2 , $\{|j, -j\rangle, \dots, |j, +j\rangle\}$.

1/ On pose $m = -j + n$ avec $n \in \{0, 1, \dots, 2j\}$. Que deviennent les relations $J_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$?

2/ Discuter la limite $n \ll j$. Comparer à l'oscillateur harmonique.