

Master Ω MEGA

Examen Physique Atomique

Durée: 3 heures

Tous documents permis

6 Juin 2005

Problème A

Dans une expérience de résonance magnétique nucléaire un atome d'hydrogène dans l'état fondamental est placé dans un champ magnétique \vec{B} . Pour simplifier les calculs, on pourra écrire l'Hamiltonien sous la forme suivante (en négligeant le couplage entre champ magnétique et moment magnétique nucléaire):

$$\mathcal{H} = 2\beta\vec{B} \cdot \vec{S} + \alpha\vec{I} \cdot \vec{S}, \quad (1)$$

où \vec{B} représente le vecteur champ magnétique, \vec{S} le moment angulaire du spin électronique, \vec{I} le moment angulaire du spin nucléaire et β et α des constantes. Le champ magnétique est aligné selon la direction \hat{x} .

Question A.1.1

Sur la base de considérations dimensionnelles, écrire les expressions de α et β en utilisant les constantes fondamentales données sur la dernière page du sujet.

Question A.1.2

Fixer les axes de quantification pour \vec{S} et \vec{I} et justifier ce choix. Pourquoi dans ce problème est-il judicieux de choisir l'axe de quantification selon la direction \hat{x} ? Justifier votre réponse.

Question A.1.3

Discuter les différents choix de représentations étant donné que \vec{S} et \vec{I} sont couplés à travers le champ magnétique. Selon vous quel serait le choix de base à faire dans les cas où B est faible et B est intense. Justifiez votre réponse.

Dans la suite on fixera $S = \frac{1}{2}$ et $I = \frac{1}{2}$ et on utilisera la base $|S, I, m_s, m_I\rangle$ que l'on pourra écrire de la forme $|m_s, m_I\rangle$.

Question A.2.1

Réécrire sous forme matricielle l'Hamiltonien, éq. (1), dans la base choisie.

Question A.2.2

Établir les règles de sélection pour les transitions induites par le couplage hyperfin.

Question A.3.1

Calculer les valeurs propres de l'énergie des différents états.

Question A.3.2

Expliciter la dégénérescence dans les cas suivants:

- $B = 0, \alpha, \beta \neq 0;$
- $B \neq 0, \alpha \neq 0, \beta = 0;$
- $B \neq 0, \alpha, \beta \neq 0.$

Question A.3.3

Tracer le(s) niveau(x) fondamental(aux) dans les trois cas suivants: 1) $|B| = 0; \beta|B| \gg \alpha|\vec{S} \cdot \vec{I}|;$
 $\beta|B| \ll \alpha|\vec{S} \cdot \vec{I}|.$

Problème B

Remarque: Les parties 1 et 2 sont indépendantes.

On considère un atome d'hydrogène dans l'état fondamental en interaction résonnante avec un champ électromagnétique de pulsation $\omega_L = \frac{\Delta\mathcal{E}}{\hbar}$ où $\Delta\mathcal{E} = \mathcal{E}(2p) - \mathcal{E}(1s)$, $2p$ et $1s$ étant les états avec $n = 1, 2$ et $l = 0, 1$.

Partie 1

Question B.1.1

Sur la base de l'expression des niveaux d'énergie de l'hydrogène, calculer la fréquence optique et la longueur d'onde (dans le vide) de la radiation électromagnétique. Dans quelle partie du spectre se trouve-t-elle?

Question B.1.2

Le champ électromagnétique circulairement polarisé se propageant selon l'axe \hat{z} :

$$\vec{E} = A\hat{e}_s e^{i(kz - \omega_L t)}. \quad (2)$$

Plus précisément, la pulsation ω_L sera choisie de façon telle à être résonnante (ou quasi résonnante) avec la transition correspondant à $j = \frac{1}{2} \leftrightarrow j' = \frac{3}{2}$ (j et j' étant le moment cinétique total de l'électron respectivement de l'état fondamental et de l'état excité).

Donner l'ordre de grandeur en énergie du couplage fin, et comparer-le à l'énergie de la transition

Remarque: Ici et dans la suite du problème on négligera la structure hyperfine.

Question B.1.3

Sur la base des considérations précédentes on pourra se limiter à considérer seulement deux des niveaux de la structure atomique (on ne tiendra pas compte de la structure des sous-niveaux Zeeman de l'atome

dans le calcul). On marquera ces deux niveaux sur le schéma complet et on justifiera ce choix.

Partie 2

Question B.2.1

Pour simplifier les notations, les deux états précédents seront identifiés par $|-\rangle$ et $|+\rangle$ (respectivement fondamental et excité) et seront les états propres de l'hamiltonien atomique H_A d'énergie \mathcal{E}_- et \mathcal{E}_+ , tandis que l'hamiltonien d'interaction avec le champ prend la forme

$$H_i = -\vec{D} \cdot \vec{E}, \quad (3)$$

$$\vec{D} = q_e \vec{R}, \quad (4)$$

où $\vec{D} = \vec{D}_r + i\vec{D}_i$ est l'opérateur dipole électrique, q_e la charge de l'électron et \vec{R} l'opérateur position. Écrire en notation matricielle l'hamiltonien total $H_T = H_a + H_i$ en explicitant ses éléments sans chercher à calculer les intégrales.

Question B.2.2

Montrer que H_T prend la forme:

$$H_T = \frac{1}{2}(\mathcal{E}_+ + \mathcal{E}_-)\mathbf{I} - (\vec{D}_r \cdot \vec{E})\sigma_x + (\vec{D}_i \cdot \vec{E})\sigma_y + \frac{1}{2}(\mathcal{E}_+ - \mathcal{E}_-)\sigma_z, \quad (5)$$

obtenue utilisant les opérateurs de Pauli (\mathbf{I} représente la matrice unité).

Question B.2.3

Obtenir les équations d'évolution pour les opérateurs de Pauli. On introduira la pulsation correspondante à la transition $\omega_0 = \frac{\mathcal{E}_+ - \mathcal{E}_-}{\hbar}$.

Question B.3.1

On continuera les calculs dans la limite semi-classique. Pour cela on considérera

$$\langle ab \rangle = \langle a \rangle \langle b \rangle, \quad (6)$$

où a et b représentent les opérateurs du problème. Donner la signification physique de cette approximation et obtenir les équations dynamiques pour les variables classiques correspondantes:

$$\frac{2}{\hbar} \vec{D} \cdot \vec{E} \rightarrow \alpha A e^{i(kz - \omega_L t)}, \quad (7)$$

$$\langle \sigma_j \rangle \rightarrow s_j, \quad (8)$$

tout en choisissant la phase de référence de façon telle que $\vec{D}_i = 0$.

Question B.3.2

En faisant l'approximation dite d'onde tournante on aboutit aux équations suivantes:

$$\dot{s}_x = -\omega_0 s_y - \alpha A \sin(\omega_L t) s_z, \quad (9)$$

$$\dot{s}_y = \omega_0 s_x + \alpha A \cos(\omega_L t) s_z, \quad (10)$$

$$\dot{s}_z = -\alpha A [\cos(\omega_L t) s_y - \sin(\omega_L t) s_x]. \quad (11)$$

On transformera ce système d'équations en utilisant la transformation suivante:

$$\vec{v} = M\vec{S}, \quad (12)$$

où

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}, \quad (13)$$

$$M = \begin{pmatrix} \cos(\omega_L t) & \sin(\omega_L t) & 0 \\ -\sin(\omega_L t) & \cos(\omega_L t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (14)$$

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Quelle est la nature de l'opérateur M ?

Question B.3.3

Montrer que $|\vec{v}| = \text{cte.}$ et interpréter le résultat.

Montrer qu'en introduisant un vecteur

$$\vec{\Omega} = \begin{pmatrix} -\alpha A \\ 0 \\ \omega_0 - \omega_L \end{pmatrix} \quad (16)$$

on peut réécrire les équations qui décrivent \dot{v} de la forme

$$\dot{\vec{v}} = \vec{\Omega} \wedge \vec{v}. \quad (17)$$

Quelle forme géométrique décrit le vecteur \vec{v} pendant son évolution temporelle?

Question B.3.4

En utilisant les éqs. (9–11) montrer que le choix

$$s_x = \cos(\omega_L t), \quad (18)$$

$$s_y = \sin(\omega_L t), \quad (19)$$

$$s_z = \text{cte.} \quad (20)$$

est une solution du problème. Tracer ces solutions sur la surface décrite par le vecteur \vec{v} .

En se souvenant du fait que pour un ensemble d'atomes décrit par l'opérateur densité ρ on obtient la même représentation mathématique des questions précédentes et que dans cette représentation:

- w correspond à la différence de population entre l'état excité et l'état fondamental de l'ensemble,
- $\rho_{-,+} = u - iv$ et son complexe conjugué représentent les cohérences de l'état,

interpréter physiquement la solution proposée dans cette question.

Compléments utiles

Pour l'atome d'hydrogène:

$$\mathcal{E}_{n,l} = -\frac{R_\infty}{n^2}, \quad (21)$$

$$R_\infty = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}, \quad (22)$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}, \quad (23)$$

avec R_∞ rayon de Rydberg, n nombre quantique de l'énergie et l nombre quantique du moment angulaire orbital, et a_0 rayon de Bohr.

Quantité physique	Symbole	Valeur	Unités
Masse de l'électron	m_e	9.10956×10^{-31}	Kg
Charge de l'électron	e	4.80325×10^{-10}	esu
Charge de l'électron	q_e	1.60219×10^{-19}	C
Constante de Planck	\hbar	1.05459×10^{-34}	$J \times s$
Fine structure constant	α	$\frac{1}{137.036}$	–

Les premières fonctions d'onde pour l'atome d'hydrogène prennent la forme fonctionnelle suivante:

$$\phi_{n=1,l=0,m=0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left\{-\frac{r}{a_0}\right\} \quad (24)$$

$$\phi_{n=2,l=0,m=0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp\left\{-\frac{r}{2a_0}\right\}, \quad (25)$$

$$\phi_{n=2,l=1,m=-1}(r, \theta, \phi) = -\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} \exp\left\{-\frac{r}{2a_0}\right\} \sin\theta \exp\{i\phi\}, \quad (26)$$

$$\phi_{n=2,l=1,m=0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} \exp\left\{-\frac{r}{2a_0}\right\} \cos\theta, \quad (27)$$

$$\phi_{n=2,l=1,m=+1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} \exp\left\{-\frac{r}{2a_0}\right\} \sin\theta \exp\{-i\phi\}. \quad (28)$$

Matrices de Pauli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (29)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (30)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (31)$$