

# PHYS-H-200 Physique quantique et statistique

## Chapitre 8: Le spin

Jean-Marc Sparenberg

2011-2012

- 1 Indices expérimentaux
  - Effet Zeeman anormal
  - Expérience de Stern et Gerlach

- 2 Description théorique
  - Spin  $\frac{1}{2}$
  - Moment cinétique général

- 3 Structures fine et hyperfine de l'atome d'hydrogène

## Atome d'hydrogène dans un champ magnétique

- Classique : électron (masse  $m_e$  et charge  $-e$ ) sur trajectoire circulaire  
 $\Rightarrow$  courant électrique  $\Rightarrow$  **moment magnétique**

$$\vec{M}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

- $\Rightarrow$  **énergie potentielle d'interaction** dans champ d'induction  $\vec{B}$

$$W = -\vec{M}_L \cdot \vec{B}$$

- Quantique (règle de correspondance) : Hamiltonien ( $\vec{B}$  homogène)

$$H \rightarrow \tilde{H} = H + \frac{e}{2m_e} BL_z, \quad (\vec{B} = B\vec{1}_z)$$

- Énergies subdivisées en  $2l + 1$  niveaux :  $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$

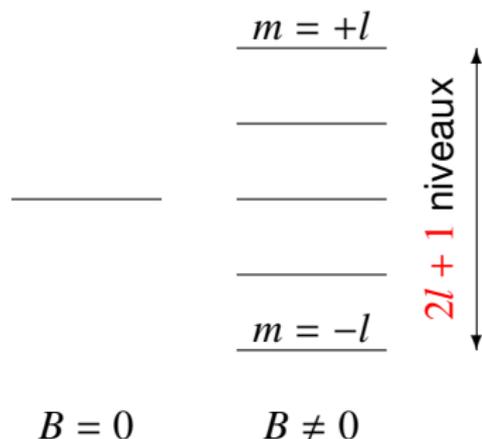
$$E_n \rightarrow \tilde{E}_{nm} = -\frac{1}{n^2} \text{Ryd} + \mu_B B m$$

- ▶ nombre quantique **magnétique**  $m = -l, \dots, l$
- ▶ magnéton de Bohr  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 5,79 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$  (petit)

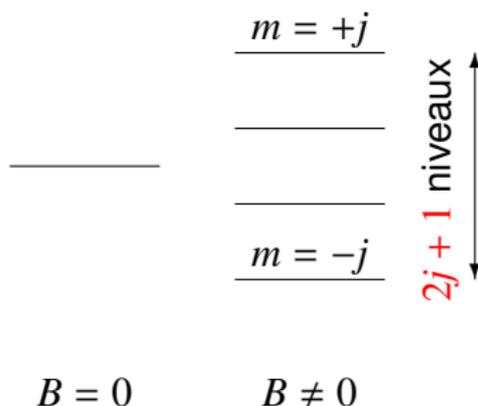
# Effet Zeeman anormal

- En principe : nombre **impair** de niveaux
- Expérimentalement : état fondamental atome H : **deux** niveaux !
- Autres atomes : deux types de cas

Effet Zeeman « **normal** »



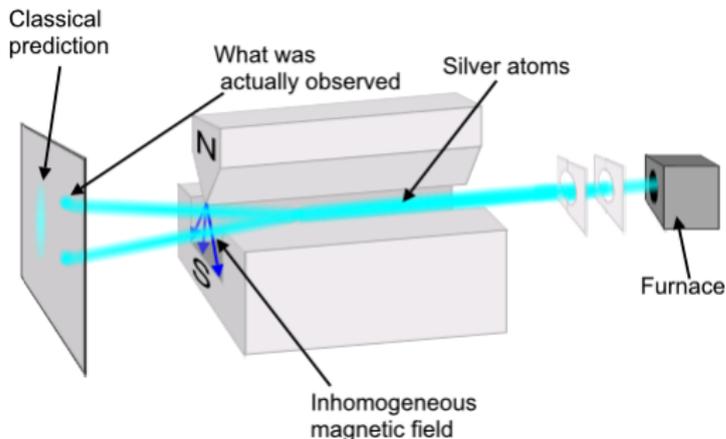
Effet Zeeman « **anormal** »



- Nombre **impair**  $2l + 1 \Rightarrow$  nombre **pair**  $2j + 1 \Rightarrow j$  **demi-entier** !?

## Expérience de Stern et Gerlach (1922)

- Mesure **moment magnétique** atomes **neutres** (force de Lorentz nulle)
- Champ d'induction **inhomogène**  $\Rightarrow$  **couplage**  $\vec{F} = -\vec{\nabla}W = \vec{\nabla}(\vec{M}_L \cdot \vec{B})$



[Wikipedia]

- Atomes d'**argent** : impacts sur le détecteur répartis en **deux** taches
- **Quantification** du moment magnétique et donc du **moment cinétique**
- Nombre **pair** d'orientations  $\Rightarrow$  pas un moment cinétique **orbital**

- 1 Indices expérimentaux
  - Effet Zeeman anormal
  - Expérience de Stern et Gerlach

- 2 Description théorique
  - Spin  $\frac{1}{2}$
  - Moment cinétique général

- 3 Structures fine et hyperfine de l'atome d'hydrogène

## Opérateur de spin

- Autre type de moment cinétique (Goudsmit et Uhlenbeck, 1926)  
Propriété **intrinsèque** de la particule (de nature physique différente du moment cinétique orbital qui est dû au **mouvement**)
- Mais **mêmes propriétés** : **relations de commutation**

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

$$[\vec{L}^2, L_x] = [\vec{L}^2, L_y] = [\vec{L}^2, L_z] = 0$$

- **Moment cinétique de spin** : opérateur **vectoriel**  $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$   
composantes **hermitiques** vérifiant

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x, \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y$$

$$[\vec{S}^2, S_x] = [\vec{S}^2, S_y] = [\vec{S}^2, S_z] = 0$$

- Pauli : relations vérifiées par les trois **matrices**  $S_k = \frac{1}{2}\hbar\sigma_k$  ( $k = x, y, z$ )  
avec les **matrices de Pauli**

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

# États d'une particule de spin 1/2

- Vérification **relations commutation** : par exemple,

$$[S_x, S_y] = \frac{1}{4}\hbar^2(\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x) = \frac{1}{4}\hbar^2(i\sigma_z + i\sigma_z) = i\hbar S_z$$

- **Carré du spin**

$$\vec{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow [\vec{S}^2, S_k] = 0 \quad (k = x, y, z)$$

- $\vec{S}^2$  et  $S_k$  **commutent**  $\Rightarrow$  vecteurs propres **communs**, simples pour  $S_z$

$$\chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- **Nombre quantiques**

- ▶ de **spin** :  $\vec{S}^2 \chi_{m_s} = \frac{3}{4}\hbar^2 \chi_{m_s} = \hbar^2 s(s+1) \chi_{m_s} \Rightarrow s = \frac{1}{2}$

$\Rightarrow$  **particules « de spin 1/2 »**

(cf particules élémentaires de **matière** : leptons et quarks)

- ▶ **magnétique** :  $S_z \chi_{m_s} = \pm \frac{1}{2}\hbar \chi_{m_s} = \hbar m_s \chi_{m_s} \Rightarrow m_s = \pm \frac{1}{2}$

$\Rightarrow$  2 états possibles : « **haut** » et « **bas** »

## Effet Zeeman atome H

- Électron : moments cinétiques **orbital** et de **spin**
- État : **spineur** à 1 composante nulle, état propre de  $\vec{L}^2$ ,  $L_z$ ,  $\vec{S}^2$ ,  $S_z$

$$\psi_{nlm_l, +\frac{1}{2}}(\vec{r}) = Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) R_{nl}(r) \chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) R_{nl}(r) \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\psi_{nlm_l, -\frac{1}{2}}(\vec{r}) = Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) R_{nl}(r) \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) R_{nl}(r) \end{pmatrix}$$

- Moment magnétique **intrinsèque**

$$\vec{M}_S = -g_e \frac{e}{2m_e} \vec{S}$$

Facteur gyromagnétique de l'électron :  $g_e \approx 2$  (équation de Dirac)

- Moment magnétique **total**

$$\vec{M} = \vec{M}_L + \vec{M}_S = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{L} + g_e \vec{S}) \approx -\frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{L} + 2\vec{S})$$

- Exemple : état fondamental :  $m_l = 0$ ,  $m_s = \pm \frac{1}{2} \Rightarrow$  **deux** niveaux

## Définition générale d'un moment cinétique

- Moment cinétique  $\vec{J} = (J_x, J_y, J_z) =$  **opérateur vectoriel** :  
trois composantes **hermitiques** vérifiant les **relations de commutation**

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

- Carré du moment cinétique  $\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, \quad [\vec{J}^2, J_k] = 0$
- Propriétés (admissibles)
  - ▶  $\psi_{jm}$  : **fonctions propres** de  $\vec{J}^2$  et  $J_z$ , **nombre quantiques**  $j$  et  $m$

$$\vec{J}^2 \psi_{jm} = \hbar^2 j(j+1) \psi_{jm} \quad J_z \psi_{jm} = \hbar m \psi_{jm}$$

- ▶  $j$  positif, entier ou demi-entier :  $j \in \left\{ 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots \right\}$
- ▶  $|m|$  est borné par  $j$  (projection sur un axe) :  $-j \leq m \leq j$
- ▶  $m$  et  $j$  sont entiers ou demi-entiers ensemble :  $j + m \in \mathbb{N}$   
 $\Rightarrow m$  peut prendre  $(2j + 1)$  valeurs
- Pour un système physique donné :
  - ▶  $j$  : unique ( $s = \frac{1}{2}$ ) ou multiple ( $l = 0, 1, 2, \dots$ )
  - ▶ valeurs de  $j$  soit **toutes entières**, soit **toutes demi-entières**
- Ne pas confondre  $\vec{J}$ ,  $\vec{J}^2$ ,  $j$  et  $m$ !!! Notation  $\vec{j}$  également utilisée!!!

## Composition de deux moments cinétiques

- Propriété : **somme de deux moments cinétiques = moment cinétique**

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$$

Démonstration :  $[J_x, J_y] = [J_{1x} + J_{2x}, J_{1y} + J_{2y}]$

$$= [J_{1x}, J_{1y}] + [J_{1x}, J_{2y}] + [J_{2x}, J_{1y}] + [J_{2x}, J_{2y}]$$

$$= i\hbar J_{1z} + 0 + 0 + i\hbar J_{2z} = i\hbar J_z$$

- Nombres quantiques de spin/de moment cinétique

$$\vec{J}_1^2 \longrightarrow \hbar^2 j_1(j_1 + 1) \quad \vec{J}_2^2 \longrightarrow \hbar^2 j_2(j_2 + 1) \quad \vec{J}^2 \longrightarrow \hbar^2 j(j + 1)$$

**Relations triangulaires** (démonstration : théorie des groupes)

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2, \quad j_1 + j_2 + j \text{ entier}$$

Variante équivalente (cf **côtés d'un triangle**)

$$|j - j_2| \leq j_1 \leq j + j_2 \quad \text{ou} \quad |j - j_1| \leq j_2 \leq j + j_1$$

- Nombres quantiques magnétiques

$$J_z = J_{1z} + J_{2z} \quad \Rightarrow \quad m = m_1 + m_2$$

## Composition de $N$ moments cinétiques

- Deux moments cinétiques :  $j_1 + j_2 + j$  **entier**  $\Rightarrow$  plusieurs possibilités :

$$\underbrace{\begin{array}{l} j_1 \text{ et } j_2 \text{ entiers} \\ j_1 \text{ et } j_2 \text{ demi-entiers} \end{array}}_{\Rightarrow j \text{ entier}} \qquad \underbrace{\begin{array}{l} j_1 \text{ entier et } j_2 \text{ demi-entier} \\ j_1 \text{ demi-entier et } j_2 \text{ entier} \end{array}}_{\Rightarrow j \text{ demi-entier}}$$

- Itération :  $N$  moments cinétiques  $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 + \vec{J}_3 = \vec{J}_{12} + \vec{J}_3 = \vec{J}_1 + \vec{J}_{23}$   
 $\Rightarrow j$  demi-entier si **nombre impair** de moments cinétiques demi-entiers
- Particules **composites** (cf nucléon, noyau  ${}^3\text{H}$ , atome H, molécule... )
  - moment cinétique total  $\vec{J}$  (nombre quantique  $j$ )

$$\vec{J} = \vec{S} + \vec{L} \equiv \sum_{i=1}^N \vec{s}_i + \sum_{i=1}^N \vec{l}_i$$

- particules de matière **élémentaires** : spin  $\frac{1}{2} \Rightarrow s_i = \frac{1}{2}$
- moments cinétiques orbitaux :  $l_i$  entiers
- « Spin » particule composite  $j$  : demi-entier si **nombre impair** spins  $\frac{1}{2}$
- Bosons** = particules (élémentaires ou composites) de spin **entier**
- Fermions** = particules (élémentaires ou non) de spin **demi-entier**

## 1 Indices expérimentaux

- Effet Zeeman anormal
- Expérience de Stern et Gerlach

## 2 Description théorique

- Spin  $\frac{1}{2}$
- Moment cinétique général

## 3 Structures fine et hyperfine de l'atome d'hydrogène

## Moment cinétique total de l'électron

- Valeurs propres  $\hbar^2 l(l+1)$ ,  $\hbar m_l$  de  $\vec{L}^2$ ,  $L_z$  :  $l, m_l$  entiers,  $-l \leq m_l \leq l$
- Valeurs propres  $\hbar^2 s(s+1)$ ,  $\hbar m_s$  de  $\vec{S}^2$ ,  $S_z$  :  $s = \frac{1}{2}$ ,  $m_s = \pm \frac{1}{2}$
- Relations triangulaires

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad \left| l - \frac{1}{2} \right| \leq j \leq l + \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad j = \left| l \pm \frac{1}{2} \right|$$

- Valeurs propres  $\hbar^2 j(j+1)$ ,  $\hbar m$  de  $\vec{J}^2$ ,  $J_z$  :  $j, m$  demi-entiers,  $-j \leq m \leq j$

$l$	$s$	$j$	notation	$m$
0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$s\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$p\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
		$\frac{3}{2}$	$p\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$
2	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$d\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$
		$\frac{5}{2}$	$d\frac{5}{2}$	$-\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

## Structure fine de l'atome d'hydrogène

- Rappel : effet **Zeeman** :  
couplage moment dipolaire magnétique avec  $\vec{B}$  **externe**
- Structure fine : effet **relativiste** : champ électrostatique du noyau  
⇒ champ magnétique dans référentiel de l'électron en rotation ( $l \neq 0$ )  
⇒ couplage moment magnétique intrinsèque avec  $\vec{B}$  **interne**
- Hamiltonien modifié par terme de **couplage spin-orbite** (éq. de Dirac)

$$\mathcal{H} \approx \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}_{LS} = \mathcal{H}_0 + 2\alpha^2 \left(\frac{a_0}{r}\right)^3 \frac{\vec{L} \cdot \vec{S}}{\hbar^2} \text{Ryd} \equiv \mathcal{H}_0 + \alpha^2 \tilde{f}(r) \vec{L} \cdot \vec{S}$$

- Ordre de grandeur : petite **perturbation**, **constante de structure fine**

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137,036} \approx \frac{1}{137} \quad (\text{sans dimension})$$

- ▶  $e^2/4\pi\epsilon_0$  : énergie × longueur **coulombienne**, petit devant  $\hbar c$
- ▶  $\hbar c$  : énergie × longueur **quantique**
- ▶ énergie de liaison de l'électron :  $\text{Ryd} = m_e c^2 \alpha^2 / 2 \ll m_e c^2$
- ▶ vitesse quadratique moyenne de l'électron :  $\sqrt{\langle v^2 \rangle_n} = \alpha c / n \ll c$

## États propres du hamiltonien de structure fine

- Hamiltonien **matriciel** (matrices de Pauli)

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &\approx \begin{pmatrix} H_0 & 0 \\ 0 & H_0 \end{pmatrix} + f(r) \vec{L} \cdot \vec{S} = \begin{pmatrix} H_0 & 0 \\ 0 & H_0 \end{pmatrix} + f(r) [L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z] \\ &= \begin{pmatrix} H_0 & 0 \\ 0 & H_0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar f(r)}{2} \begin{pmatrix} L_z & L_x - iL_y \\ L_x + iL_y & -L_z \end{pmatrix} \end{aligned}$$

- États stationnaires : spineurs à **deux composantes** non nulles, états propres de  $\vec{L} \cdot \vec{S}$ ,  $\vec{L}^2$  et  $\vec{S}^2 \Rightarrow$  également états propres de  $\vec{J}^2$  :

$$\vec{J}^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S} \quad \Rightarrow \quad \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2}{2}$$

$\Rightarrow$  caractérisés par nombre quantique  $j$  et valeur propre  $j(j+1)$

- Exemple : état fondamental **1s**

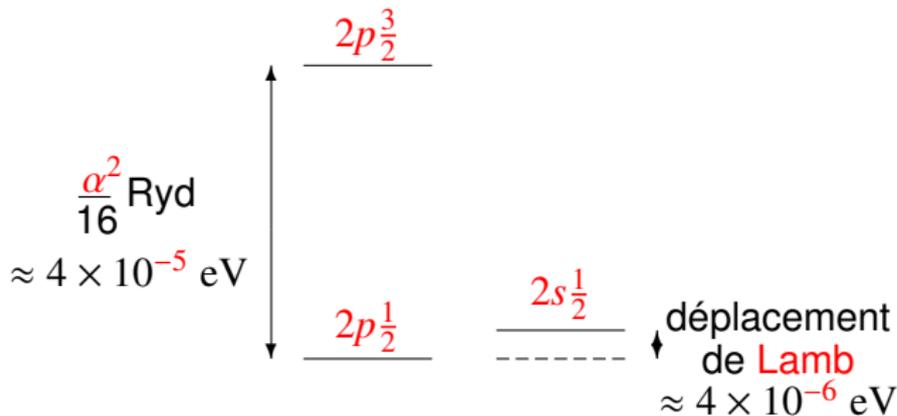
$$l = 0, s = \frac{1}{2} \Rightarrow j = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \vec{L} \cdot \vec{S} = 0$$

$\Rightarrow$  **pas de structure fine** (moment cinétique orbital nul)

$\Rightarrow$  idem pour tous les états  $s$

Structure fine de l'état  $2p$ 

- $l = 1, s = \frac{1}{2} \Rightarrow \frac{1}{2} \leq j \leq \frac{3}{2} \Rightarrow j = \frac{1}{2} \text{ ou } j = \frac{3}{2} \Rightarrow \text{états } 2p_{\frac{1}{2}} \text{ et } 2p_{\frac{3}{2}}$
- Énergies expérimentales :



- Énergies théoriques (équation de Dirac) **indépendantes de  $l$**  :

$$E_{nlj} = \left[ -\frac{1}{n^2} - \frac{\alpha^2}{n^4} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] \text{Ryd}_\mu$$

- Déplacement de Lamb (1947) : **théorie quantique des champs**

## Structure hyperfine

- Hamiltonien  $\mathcal{H}$  modifié par un **potentiel hyperfin** : couplage **moments magnétiques** électron et proton

- Spin du **proton** :  $I = \frac{1}{2} \Rightarrow$  moment magnétique  $\vec{M}_I = g_p \frac{e}{2m_p} \vec{I}$

Moment cinétique total de l'**atome** :  $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$

Relations triangulaires :  $F = |j \pm \frac{1}{2}|$

- Exemple : **état fondamental**

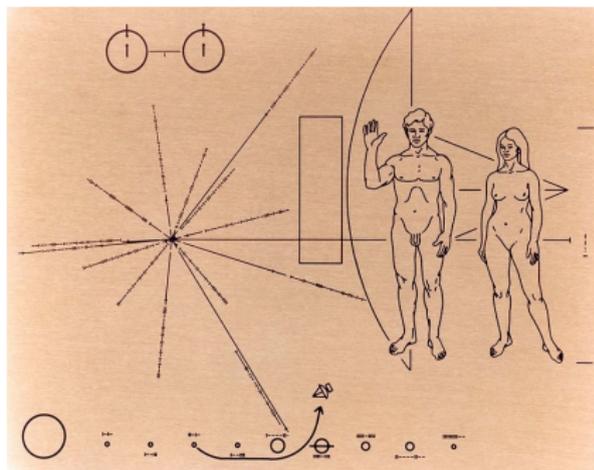
$$1s \frac{1}{2} \quad \frac{F=1}{F=0} \quad \updownarrow \Delta E$$

- Transition  $F=1 \rightarrow F=0$  :

$$\Delta E \approx 6 \times 10^{-6} \text{ eV}$$

$\Rightarrow$  longueur d'onde  $\lambda \approx 21 \text{ cm}$

- ▶ radioastronomie
- ▶ plaque sondes Pioneer



[NASA]