Année universitaire 2021/2022
David Amans, Thomas Niehaus, Andrew Pell, Fabien Vialla

Partiel (Bonus) – 8 avril 2022 (2h)

Données utiles

— $e = 1.6 \times 10^{-19}$ C (charge de l'électron)
— $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg (masse de l'électron)
— $a_0 = 0.5 \times 10^{-10}$ m (rayon de Bohr)
— $c = 3 \times 10^8$ m/s (vitesse de la lumière)
— $1\text{Ry} = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = 13.6$ eV (Rydberg)
— $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ (magnéton de Bohr)
— Règle d'or de Fermi : en présence de la perturbation $V(t) = \frac{1}{2}\left(V_0 e^{-i\omega t} + V_0^\dagger e^{i\omega t}\right)$ le taux de transition entre états imperturbés du Hamiltonien $|\psi_a\rangle$, $|\psi_b\rangle$ vaut

$$\Gamma_{a\to b} = \frac{2\pi}{\hbar^2}|\langle\psi_b|V_0|\psi_a\rangle|^2\delta(\omega - \omega_{ba})$$

avec $\omega_{ba} = (E_b - E_a)/\hbar$.
— Théorème de Wigner-Eckart pour les opérateurs vectoriels $\boldsymbol{V} = (V_{-1}, V_0, V_1)$ et les états propres de momentum angulaire $|jm_j\rangle$ et $|j'm_j'\rangle$:

$$\langle j'm_j'|V_q|jm_j\rangle = \langle j'||V||j\rangle\, C^{1j}_{qm_j;j'm_j'}$$

1 Question courtes

Ces questions ne nécessitent que quelques lignes (voir une seule !) de calcul ou d'argument pour leur réponse.

Q1. On somme deux moments angulaires $\boldsymbol{L}_1$ et $\boldsymbol{L}_2$ avec les nombres quantiques $l_1 = 3/2$ et $l_2 = 3$ associés à $\boldsymbol{L}_1^2$ et $\boldsymbol{L}_2^2$ respectivement. Parmi les valeurs ci-dessous, selectionner les valeurs pour le nombre quantique l associé à $\boldsymbol{L}^2 = (\boldsymbol{L}_1 + \boldsymbol{L}_2)^2$ qui sont *possibles.*

$$l = 1/2 \qquad l = 5/2 \qquad l = 3/2 \qquad l = 1\ .$$

Solution

$l = 3/2$ et $l = 5/2$.

Q2. Pourquoi le niveau d'énergie $2S_{1/2}$ de l'atome d'hydrogène est-il metastable ?

Solution

C'est à cause de la règle de sélection $\Delta l = \pm 1$ qui l'empêche de decroitre vers l'état $1S_{1/2}$ avec une transition permise en approximation de dipole.

Q3. La fonction d'onde radiale d'une atome à un électron (avec Z charge dans le noyau) est du type

$$\mathscr{R}_{nl}(r) = \frac{f_{nl}(Zr/a_0)}{(a_0/Z)^{3/2}}\ .$$

On considère la valeur moyenne de la coordonée radiale à la puissance p, $\langle r^p\rangle$. Comment dépend elle de Z et a_0 ?

Solution

$$\langle r^p \rangle = \frac{1}{(a_0/Z)^3} \int dr r^2 f_{nl}(Zr/a_0) r^p = \left(\int dx x^{2+p} f_{nl}(x) \right) \left(\frac{a_0}{Z} \right)^p$$

Q4. Les niveaux $2S_{1/2}, 2P_{1/2}$ et $2P_{3/2}$ sont tous dégénérés selon la théorie de Schrödinger de l'atome d'hydrogène. Identifier le mécanisme physique qui lève la dégénéréscence entre chaque paire de niveaux.

Solution

$2S_{1/2}$ et $2P_{1/2}$: décalage de Lamb ; $2S_{1/2}$ et $2P_{3/2}$, ainsi que $2P_{1/2}$ et $2P_{3/2}$: correction relativistes à l'atome d'hydrogène.

Q5. Parmi les niveaux d'energie suivants pour l'atome d'hydrogène, donner ceux qui n'existent *pas*. Justifier.

$$1P_{3/2} \quad 4D_{5/2} \quad 4P_{5/2} \quad 5D_{1/2} \quad 3F_{5/2} \quad 4F_{7/2}$$

Solution

$1P_{3/2}$ $(l > n-1)$ $\quad$ $4P_{5/2}$ $(j > l + S)$ $\quad$ $5D_{1/2}$ $(j < l - S)$ $\quad$ $3F_{5/2}$ $(l > n-1)$

Q6. Soit $\alpha = \hbar/(mca_0)$ la constante de structure fine. Donner la dépendance en α pour l'énergie ΔE des transitions suivantes :

$$1S_{1/2} \to 2P_{1/2} \quad 2S_{1/2} \to 2P_{1/2} \quad 2S_{1/2} \to 2P_{3/2}$$

Solution

$1S_{1/2} \to 2P_{1/2}$: transition entre niveau de structure principale, donc $\Delta E \sim \alpha^0$; $2S_{1/2} \to 2P_{1/2}$: transition entre états clivés par décalage de Lamb, donc $\Delta E \sim \alpha^3 \log(\alpha)$; $2S_{1/2} \to 2P_{3/2}$: transition entre états clivés par les corrections relativistes, donc $\Delta E \sim \alpha^2$.

Q7. On considère les isotopes de l'hydrogène : le deuterium ^{2}H et le tritium ^{3}H. Le deuterium a un spin nucléaire avec nombre quantique $I = 1$, alors que le tritium a $I = 1/2$. Déterminer les valeurs possibles de F pour le deux atomes dans les niveaux hyperfins dans lesquels se clive le niveau $1S_{1/2}$.

Solution

Deuterium : $F = |j - I|, ..., |j + I| = 1/2, 3/2$. Tritium : $F = 0, 1$ (comme pour l'hydrogène).

Q8. On envoie un laser polarisé circulaire gaucher (σ^-) sur un atome d'hydrogène dans l'état $2S_{1/2}|F = 0, m_F = 0\rangle$; la fréquence du laser est quasi-résonante avec la transition $2S_{1/2} \to 3P_{1/2}$. En approximation de dipole, quel est le seul état hyperfin vers lequel l'atome peut transitionner ?

Solution

C'est $2S_{1/2}|F = 1, m_F = -1\rangle$, afin d'avoir $\Delta m_F = -1$.

Q9. Si on fait une inversion spatiale $(\theta \to \pi - \theta, \phi \to \phi + \pi)$, comment varie le signe du produit d'harmoniques sphériques $\mathscr{Y}_{20}(\theta,\phi)\, \mathscr{Y}_{10}(\theta,\phi)\, \mathscr{Y}_{1,-1}(\theta,\phi)$?

Solution

Il ne varie pas, puisque la parité du produit est $(-1)^{2+1+1} = 1$.

Q10. Pourquoi les états propres d'un atome ne sont pas des états stationnaires ? **(question bonus)** Et que pourrait-on faire pour allonger leur durée de vie ?

Solution

Il ne sont pas stationnaire à cause de l'émission spontanée. Pour réduire le taux d'émission spontanée, les atomes pourraient être mis dans une cavité, dans laquelle le champ électromagnétique ne possède que certaines fréquences discrètes, pourvu que ces fréquences soient différentes par rapport à la fréquence de transition de l'atome vers l'état fondamental.

2 Problème : Transition de dipole magnétique

On a vu en cours que le Hamiltonien d'intéraction entre atome d'hydrogène et un champ éléctromagnétique décrit à travers du potentiel vecteur $\boldsymbol{A}$ s'écrit comme

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{e}{m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} \tag{1}$$

(en négligeant le terme d'ordre $\boldsymbol{A}^2$). On considérera dans la suite une onde plane monochromomatique avec un vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$ et une polarisation $\boldsymbol{\epsilon}$, dont le potentiel vecteur est donné par

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \frac{A_0}{2}\left(\boldsymbol{\epsilon}\; e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} + \text{c.c.}\right) . \tag{2}$$

Les champs électrique et magnétique associés à ce potentiel vecteur valent

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) &= \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{E}_0 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} + \text{c.c.}\right) \\ \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) &= \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{B}_0 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} + \text{c.c.}\right) \end{aligned} \tag{3}$$

avec $\boldsymbol{E}_0 = i\omega A_0\boldsymbol{\epsilon}$, $\boldsymbol{B}_0 = iA_0(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\epsilon})$.

Dans la suite, nous allons nous intéresser à une transition entre deux états atomiques $|\psi_a\rangle$ et $|\psi_b\rangle$ d'énergie E_a et E_b respectivement, telle que $\omega_{ba} = (E_b - E_a)/\hbar \approx \omega$. Le taux de transition par unité de temps est donné par

$$\Gamma_{a\to b} = \frac{2\pi}{\hbar^2}|M_{ba}|^2\delta(\omega-\omega_{ba}) . \tag{4}$$

2.1

Rappeler la forme de l'élément de matrice M_{ba}.

Solution

$$M_{ba} = \frac{eA_0}{2m}\langle\psi_b|e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p}|\psi_a\rangle .$$

2.2

Dans le reste de l'exercice on va considérer une transition *interdite* en approximation de dipole électrique. Justifier donc que, en prenant un développement limité de $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$, le premier élément de matrice non-nul à considérer correspond à

$$M_{ba} = i\frac{eA_0}{2m}\langle\psi_b|(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p})|\psi_a\rangle . \tag{5}$$

Solution

Ça suit immédiatement du développement de Taylor de l'exponentiel $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$, sachant que l'interdiction en approximation de dipole électrique implique que $\langle\psi_b|(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p})|\psi_a\rangle$.

2.3

On utilise l'identité pour les vecteurs

$$(\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}) \cdot (\boldsymbol{c} \times \boldsymbol{d}) = (\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{c})(\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{d}) - (\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{c})(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{d}) \,. \tag{6}$$

Montrer alors que

$$M_{ba} = \frac{\mu_B}{\hbar} \langle \psi_b | \, \boldsymbol{B}_0 \cdot \boldsymbol{L} \, | \psi_a \rangle + \text{terme extra} \tag{7}$$

où le terme extra est à determiner. Ce deuxième terme, associé à l'interaction entre une onde électromagnétique et moment de le moment électrique quadrupolaire de l'atome, sera négligé dans la suite.

Solution

Le premier terme suis immédiatement de l'identité vectorielle. Le deuxième terme aussi, et il est

$$\text{terme extra} = \frac{i A_0 \mu_B}{\hbar} \langle \psi_b | (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{r})(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}) | \psi_a \rangle \,.$$

2.4

En utilisant la règle d'or de Fermi, conclure alors que le taux de transition est identique à celui induit par un champ magnétique oscillant $\boldsymbol{B}(t) = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{B}_0 e^{-i\omega t} + \text{c.c.}\right)$ couplé au moment de dipole magnétique *orbitalaire* de l'atome, $\boldsymbol{m}_{\text{orb}} = -\mu_B \boldsymbol{L}/\hbar$.

Solution

Ce couplage aurait la forme $-\boldsymbol{m}_{\text{orb}} \cdot \boldsymbol{B}(t) = \mu_B \frac{1}{2} \boldsymbol{B}_0 \cdot \boldsymbol{L} + \text{h.c.}$, d'où le résultat en utilisant la règle d'or de Fermi.

2.5

En approximation de dipole électrique, l'ordre de grandeur de l'élément de matrice est $|M_{ba}^{(\text{dip})}| \sim A_0 \omega e a_0$. Estimer $|M_{ba}|$ en termes de A_0, k et de constantes fondamentales dans le cas du dipole magnétique orbitalaire que nous considérons ici, et montrer que

$$\frac{|M_{ba}|^2}{|M_{ba}^{(\text{dip})}|^2} \sim \frac{\text{Ry}}{2mc^2} \,. \tag{8}$$

Estimer l'ordre de grandeur de ce rapport.

Solution

On a que $|M_{ba}| \sim B_0 \mu_B = A_0 k e \hbar/(2m)$, d'où suit immédiatement le résultat. Le rapport est d'ordre 10^{-5}.

2.6

Jusque là on a oublié le couplage entre le champ magnétique de l'onde e.m. et le moment magnétique associé au *spin* de l'électron, $\boldsymbol{m}_{\text{spin}} = g \mu_B \boldsymbol{S}/\hbar$ ($g \approx -2$), à savoir un terme de perturbation de la forme $\mathscr{H}_{\text{spin}} = -\boldsymbol{m}_{\text{spin}} \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}, t)$. Cet oubli est légitime en approximation de dipole électrique ; pourquoi cesse-t-il de l'être dans les conditions présentes ?

Solution

Puisque le terme d'interaction champ magnétique / spin est d'ordre $\mu_B B_0$, à savoir du même ordre que le couplage entre champ magnétique et moment magnétique orbitalaire.

2.7

On en déduit que l'effet du couplage à l'onde e.m. correspond à une perturbation de la forme

$$V(t) = \frac{\mu_B}{\hbar}(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})\cdot\left(\frac{\boldsymbol{B}_0}{2}e^{-i\omega t}+\text{c.c.}\right) \tag{9}$$

(il suffit de négliger la dépendance spatiale de $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)$ dans le couplage avec le spin), et que donc une transition $a \to b$ est possible en *approximation du dipole magnétique* ssi $\langle\psi_a|(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\epsilon})\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})|\psi_b\rangle \neq 0$.

On s'intéresse donc aux *règles de sélection* pour une transition permise au niveau du dipole magnétique.

On commence avec des états propres de l'atome d'hydrogène en structure principale, $|nlm\rangle|Sm_s\rangle$: rappeler à quoi correspondent les nombres quantiques qui étiquettent l'état.

Solution

n : énergie ; l longueur du momentum angulaire $\boldsymbol{L}^2$; m projection selon z, L^z ; S longueur du spin $\boldsymbol{S}^2$, m_s projection du spin selon z, S^z.

2.8

Ensuite, en considérant la composante sphérique $L_q = \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{u}_q$ de $\boldsymbol{L}$ ($\boldsymbol{u}_0 = \boldsymbol{e}_z$, $\boldsymbol{u}_{\pm1} = (\boldsymbol{e}_x \pm i\boldsymbol{e}_y)/\sqrt{2}$), montrer que

$$\langle n'l'm'|L_q|nlm\rangle = \delta_{l,l'}\langle n'lm'|L_q|nlm\rangle\ . \tag{10}$$

Suggestion : calculer l'élément de matrice $\langle n'l'm'|L_q\boldsymbol{L}^2|nlm\rangle$ en utilisant le fait que $[L_q,\boldsymbol{L}^2] = 0$.

Solution

$$\langle n'l'm'|L_q\boldsymbol{L}^2|nlm\rangle = \hbar^2 l'(l'+1)\langle n'l'm'|L_q|nlm\rangle = \langle n'l'm'|\boldsymbol{L}^2 L_q|nlm\rangle = \hbar^2 l(l+1)\langle n'l'm'|L_q|nlm\rangle$$

et donc soit $\langle n'l'm'|L_q|nlm\rangle = 0$ ou autrement $l = l'$.

2.9

En déduire que

$$\langle n'l'm'|\langle Sm_s'|(L_q+2S_q)|nlm\rangle|Sm_s\rangle \neq 0 \tag{11}$$

sous les conditions que $\Delta l = l'-l = 0$, $\Delta m = m'-m = 0, q$, $\Delta m_s = m_s'-m_s = 0, q$.

Solution

La règle $\Delta l = 0$ suit directement du résultat précédent, ainsi que du fait que S_q ne peut pas changer le moment angulaire orbitalaire. $\Delta m = q$ vient du théorème de Wigner-Eckart pour L_q alors que $\Delta m = 0$ vient de S_q ; pareil pour $\Delta m_s = q$ qui vient de Wigner-Eckart pour S_q et pour $\Delta m_s = 0$ qui vient de L_q.

2.10

Donner alors les règles de sélection $\Delta j, \Delta l, \Delta m_j$ pour deux états en structure fine $|nlS;jm_j\rangle$, $|n'l'S;j'm_j'\rangle$. Est-ce que la décroissance spontanée $2S_{1/2} \to 1S_{1/2}$ est possible au niveau des transitions de dipole magnétique ?

Solution

Par Wigner-Eckart, $\langle j'm_j'|(L_q+2S_q)|jm_j\rangle \neq 0$ si $\Delta j = 0, \pm1$ et $\Delta m_j = q$. Donc la décroissance $2S_{1/2} \to 1S_{1/2}$ avec $\Delta l = 0$, $\Delta j = 0$ est tout à fait possible.

2.11 (Question bonus)

On considère une polarisation $\boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{u}_{q'}$ et un vecteur d'onde $\boldsymbol{k} = k\boldsymbol{e}_z$. Comment est-ce que q' rentre dans les règles de sélection entre états de structure fine ?

Solution

A différence des transitions permises au niveau de l'approximation de dipole électrique, on a que $B_0 \perp \boldsymbol{\epsilon}$. En particulier, si on a $\boldsymbol{k}$ selon z, alors $q' = \pm 1$. Mais on trouve facilement que $\boldsymbol{B}_0 \sim \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{\epsilon} \sim \boldsymbol{u}_{q'}$. Donc $\Delta m_j = q'$.

2.12 (Question bonus)

Est-ce que la transition $1S_{1/2}|F = 0, m_F = 0\rangle \to 2S_{1/2}|F = 0, m_F = 0\rangle$ est possible en approximation de dipole magnétique ?

Solution

Non, puisque par Wigner-Eckart $\langle \gamma; F, m_F = 0|(L_q + 2S_q)|\gamma'; F' = 0, m'_F = 0\rangle = 0$ – en fait l'élément de matrice s'annule pour n'importe quel opérateur vectoriel.

Note : une fameuse transition de dipole magnétique est la décroissance spontanée $1S_{1/2}, F = 1 \;\to\; 1S_{1/2}, F = 0$ dans l'hydrogène, avec longueur d'onde associée de 21 cm. La radiation émise est très importante en radio-astronomie comme un des marqueurs principaux de la présence d'hydrogène dans l'espace ; sa detection a permis par exemple la reconstruction de la structure en spirale de notre galaxie.