Année universitaire 2023/2024
D. Amans, C.Montagnon, T. Niehaus, A. Pell, T. Roscilde

Partiel (Bonus) – 25-29 mars 2024

Cet examen est un devoir-maison : afin de mieux tester vos connaissances, vous êtes encouragé.e.s à le travailler seul.e.s, mais aussi à vous servir de tout le matériel que vous le souhaitez, et notamment du matériel du cours et des TDs. Le sujet d'examen ne nécessite pas de données que vous ne puissiez trouver dans le cours et les TDs. Le temps que vous allez passer dans la préparation de votre copie est laissé à votre discretion, mais idéalement il ne devrait pas dépasser les 3 heures.

1 Question courtes

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

Q1. A l'aide du théorème de Wigner-Eckart, calculer pour quelles valeurs de $\Delta l = l' - l$ et $\Delta m = m' - m$ cet élément de matrice entre états propres de l'atomes d'hydrogène ne s'annule pas :

$$\langle nl'm'|(xp_z - zp_x)|nlm\rangle \ . \tag{1}$$

Solution: On a que $xp_z - zp_x = -L^y = \boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{u}_1 - \boldsymbol{u}_{-1})/(\sqrt{2}i)$; donc $\Delta l = 0$ et $\Delta m = \pm 1$.

Q2. Un atome voyage à une vitesse $\boldsymbol{v}$ par rapport à une source de lumière de fréquence ω et vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$. Quel est la condition sur ω pour que l'atome puisse absorber un photon et faire un transition entre un état à énergie E_1 et un état à énergie E_2 ?

Solution: A cause du décalage Doppler (la source de lumière voyage à une vitesse $-\boldsymbol{v}$ par rapport à l'atome) :

$$\omega = (E_2 - E_1)/\hbar + \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v} + \frac{\hbar k^2}{2M} \ .$$

Q3. Un atome d'hydrogène muonique est un atome dans lequel on a substitué l'électron avec un muon – particule avec la même charge que l'électron, mais avec une masse $m_\mu \approx 200 m_e$ où m_e est la masse de l'électron. Pour rappel, l'équation de Schrödinger pour la variable relative au centre de masse est toujours

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r}\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{2}$$

où μ est la masse réduite (à préciser). Trouver l'expression du rayon de Bohr muonique a_μ qui permet d'adimensionaliser cette équation. Que peut-on en déduire sur la taille de l'atome d'hydrogène muonique par rapport à celle de l'atome d'hydrogène standard ?

Solution: On a que $\mu = m_p m_\mu/(m_\mu + m_p) \approx 0.83 m_\mu \approx 167 m_e$. Donc le rayon de Bohr muonique est $a_\mu = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(e^2\mu) \approx a_0/167$, à savoir l'atome muonique est 167 plut petit (en taille linéaire caractéristique) par rapport à l'atome d'hydrogène "électronique".

Q4. Quel aspect est en commun entre le terme de Darwin et le décalage de Lamb ?

Solution: Dans le deux cas il s'agit d'un élargissement effectif de la taille des orbitales, qui affecte en particulier les orbitales de type s (en fait exclusivement ces orbitales dans le cas du terme de Darwin). Donc l'énergie de ces orbitales monte puisque leur élargissement éloigne l'électron du noyau et donc mène à une augmentation de l'énergie de Coulomb.

Q5. Les deuterium ^{2}H et tritium ^{3}H sont isotopes de l'hydrogène avec un et deux neutrons dans le noyau, respectivement. Les multiplets hyperfins de plus basse énergie ont $F = 1/2, 3/2$ dans le cas de ^{2}H et $F = 0, 1$ dans le cas de ^{3}H ; en déduire la valeur de I (spin nucléaire) pour les deux isotopes.

Solution: $I = 1$ pour ^{2}H et $I = 1/2$ pour ^{3}H.

Q6. On prépare un atome d'hydrogène dans l'état $2P_{1/2}|F=0, m_F=0\rangle$, et, suite à la décroissance de l'atome, on détecte un photon de polarisation σ^+. Dans quel état est tombé l'atome ?

Solution: Dans $1S_{1/2}|F=1, m_F=-1\rangle$, qui est le seul état de plus basse énergie par rapport à l'état initial qui a $m_F=-1$, à savoir inférieur d'une unité par rapport à celui de départ, ce qui justifie l'émission d'un photon σ^+.

Q7. Lesquels parmi ces états sont impossibles pour l'atome d'hydrogène, et pourquoi ?
a) $3D_{5/2}$ b) $2P_{3/2}|F=0, m_F=0\rangle$ c) $4F_{3/2}$ d) $3D_{3/2}$

Solution: b) puisque $F=0$ est incompatible avec $j=3/2$; c) $j=3/2$ est incompatible avec $l=3$.

Q8. La ligne spectroscopique Lyman-α est associée à la transition entre niveaux 1s et 2p. En prenant en compte la structure fine et hyperfine, combien de sous-lignes devrait-on trouver (en approximation de dipole électrique), et elles sont associées à quelles transitions ?

Solution: On s'attend à six sous-lignes spectroscopiques, associées aux transitions 1) entre $1S_{1/2}|F=0, m_F=0\rangle$ et les états $2P_{1/2}|F=1, m_F\rangle$, $2P_{3/2}|F=1, m_F\rangle$ et (la transition $F=0 \to F=0$ étant interdite, ainsi que $F=0 \to F=2$) ; et 2) entre $1S_{1/2}|F=1, m_F\rangle$ et $2P_{1/2}|F=0, m_F\rangle$, $2P_{1/2}|F=1, m_F\rangle$, $2P_{3/2}|F=1, m_F\rangle$ et $2P_{3/2}|F=2, m_F\rangle$

Q9. Pour quelles valeurs de $\Delta l = l' - l$ a-t-on que cet élément de matrice entre orbitales de l'atome d'hydrogène

$$\langle n'l'm'|xy|nlm\rangle \tag{3}$$

ne s'annule pas ?

Solution: On peut se dire que xy est symétrique par inversion du référentiel, ou autrement que $x, y \sim \sin\theta \sim \mathscr{Y}_{1,\pm1}$, et donc la parité de xy est $(-1)^2 = 1$. Donc, puisque

$$\langle n'l'm'|xy|nlm\rangle = \int dr r^2 \mathscr{R}^*_{n'l'} \mathscr{R}_{nl} \int d\Omega\, xy\, \mathscr{Y}^*_{l'm'} \mathscr{Y}_{lm}$$

on a que l'integrand a la parité $(-1)^{l+l'}$, ce qui demande $\Delta l = 0, \pm2, \pm4, \ldots$ pour que l'intégrale ne s'annule pas.

Q10. On considère un oscillateur harmonique unidimensionnel forcé périodiquement, avec Hamiltonien

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \gamma x \cos(\omega t) \tag{4}$$

où $\mathscr{H}_0 = p^2/(2m) + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2$. En utilisant la théorie des perturbations dépendante du temps, écrire le taux de transition entre état fondamental $|n=0\rangle$ et premier état excité $|n=1\rangle$.

Solution: En utilisant la règle d'or de Fermi

$$\Gamma_{0\to1} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 |\langle 0|x|1\rangle|^2 \delta(\omega - \omega_0)$$

puisque l'énergie de transition est $\hbar\omega_0$.

Q11. Est-ce que le niveau $3S_{1/2}$ de l'atome d'hydrogène correspond à des états métastables ? Argumenter votre réponse.

> **Solution:** Non, un état en $3S_{1/2}$ peut décroitre par une transition de dipole vers un état en $2P_{1/2}$ ou $2P_{3/2}$, qui en suite va décroitre rapidement vers un état en $1S_{1/2}$.

Q12. Les effets relativistes sont plus importants dans l'atome de H ou dans le ion He^+, ou encore dans l'ion Li^{2+} ? Offrir tous les arguments à votre disposition pour justifier votre réponse.

> **Solution:** Les corrections relativistes au spectre vont comme Z^4, donc elles sont $3^4 = 81$ fois plus fortes dans Li^{2+} que dans H, et $2^4 = 16$ fois plus fortes dans He^+ que dans H. Cela est dû au fait que le rayon de Bohr est diminué d'un facteur Z, donc l'électron est plus proche du noyau et sa vitesse va comme $v \sim \hbar Z/ma_0$, donc elle est plus importante devant c. Néanmoins cela impliquerait seulement un scaling en Z^2 des effets relativistes – qui vont comme $(v/c)^2$. Le facteur Z^2 ultérieur vient du fait que l'unité fondamentale d'énergie scale aussi avec Z comme Ry $\to Z^2$ Ry. Donc la correction *relative* aux énergies de la structure principale (qui varient comme Z^2) augmente comme Z^2 – comme l'argument sur la vitesse le suggérait.

2 Problème : Structure hyperfine de l'atome d'hydrogène

Dans ce problème on va explorer en détail le couplage entre électron et spin nucléaire, qui mène à la structure hyperfine dans l'atome d'hydrogène.

Le spin nucléaire $\boldsymbol{I}$ de l'hydrogène est associé à un moment magnétique nucléaire $\boldsymbol{m}_N = g_p \mu_N \boldsymbol{I}/\hbar$, où g_p est le facteur gyromagnétique du proton, et μ_N le magnéton de Bohr nucléaire.

2.1

Le Hamiltonien $\mathscr{H}_{\mathrm{HF}}$ est traité comme perturbation des états imperturbés de l'électron et spin nucléaire du type :

$$|nlS; jm_j\rangle \otimes |Im_I\rangle \,. \tag{5}$$

Rappeler les opérateurs dont de tels états sont états propres ; et justifier que pour le calcul d'éléments de matrice du type

$$\langle nlS; jm'_j| \otimes \langle Im'_I| \, \mathscr{H}_{\mathrm{HF}} \, |nlS; jm_j\rangle \otimes |Im_I\rangle \tag{6}$$

avec $l \neq 0$ il suffit de connaitre la forme de $\mathscr{H}_{\mathrm{HF}}$ pour des valeurs $\boldsymbol{r} \neq 0$ de la distance entre électron et proton.

> **Solution:** Les états imperturbés sont états propres de $\mathscr{H}_0$ (le Hamiltonien de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène), $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$, J^z, $\boldsymbol{I}^2$ et I^z. Les orbitales avec $l \neq 0$ s'annulent en $r = 0$ (comme r^l), d'où le fait que seulement la structure de l'interaction hyperfine pour $r \neq 0$ est importante pour calculer l'élément de matrice.

2.2

Rappeler en quelques mots pourquoi le couplage hyperfin entre spin nucléaire et électron peut être traité comme perturbation à la structure fine et décalage de Lamb dans l'atome d'hydrogène.

> **Solution:** La structure fine implique des corrections aux énergies de la structure principale de l'ordre de α^2 Ry, et le décalage de Lamb des corrections de l'ordre de $\alpha^3 |\log \alpha|$ Ry. Le couplage de structure fine a une énergie de l'ordre de $\mu_0 \mu_N \mu_B / a_0^3 \sim (m_e/m_p)\alpha^2 \approx 10^{-3}\alpha^2$, qui est un ordre de grandeur plus petit que le décalage de Lamb.

2.3

Le potentiel vecteur $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ associé au champ magnétique engendré par le moment magnétique du noyau a la forme

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{\boldsymbol{m}_N \times \boldsymbol{r}}{r^3} \tag{7}$$

et il est couplé au mouvement orbitalaire de l'électron par le terme

$$\mathscr{H}_1 = \frac{e}{2m}\left(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}\right) + \frac{e^2\boldsymbol{A}^2}{2m}\ . \tag{8}$$

Dans la suite on néglige le terme quadratique en $\boldsymbol{A}$. En se rappelant du fait que $\boldsymbol{\nabla}\cdot(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}) = (\nabla\times\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{b} - \boldsymbol{a}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{b})$ et que $\boldsymbol{r}/r^3 = -\nabla(1/r)$, montrer que $\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A} = 0$ pour $r \neq 0$. Conclure donc que $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$.

Solution:

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A} = \boldsymbol{m}_N\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\left(\boldsymbol{\nabla}\frac{1}{r}\right) + \frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{m}_N = 0$$

puisque $\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta(r)$ et donc il s'annule pour $r\neq 0$. Enfin $(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A})\psi = -i\hbar(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A})\psi - i\hbar\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi = (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})\psi$.

2.4

En utilisant le potentiel vecteur en Eq. (7), montrer que

$$\mathscr{H}_1 = \frac{g_p\mu_0\mu_B\mu_N}{2\pi r^3}\frac{\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{I}}{\hbar^2} \tag{9}$$

où μ_B est le magnéton de Bohr électronique et $\boldsymbol{L}$ le moment cinétique orbitalaire de l'électron.

Solution: On a que $(\boldsymbol{I}\times\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{p} = (\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{I} = \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{I}$ d'où le résultat, en utilisant aussi le fait que $e\hbar/(2m) = \mu_B$.

2.5

L'interaction entre dipole magnétique électronique et nucléaire (à savoir, entre le champ magnétique créé par le noyau, ou $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}$, et le moment magnétique électronique) prend la forme (pour $r\neq 0$) :

$$\mathscr{H}_2 = \frac{\mu_0}{4\pi}\left[\frac{\boldsymbol{m}_N\cdot\boldsymbol{m}_e}{r^3} - 3\frac{(\boldsymbol{m}_N\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{m}_e\cdot\boldsymbol{r})}{r^5}\right] \tag{10}$$

où $\boldsymbol{m}_e = g_e\mu_B\boldsymbol{S}$ est le moment magnétique intrinsèque de l'électron, g_e son facteur gyromagnétique, et $\boldsymbol{S}$ son spin. Montrer donc que l'interaction hyperfine pour $r\neq 0$ prend la forme suivante

$$\mathscr{H}_{\text{HF}} = \mathscr{H}_1 + \mathscr{H}_2 = \frac{g_p\mu_0\mu_B\mu_N}{2\pi\hbar^2 r^3}\left[(\boldsymbol{L}-\boldsymbol{S})\cdot\boldsymbol{I} + 3(\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})(\boldsymbol{I}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})\right] = \frac{g_p\mu_0\mu_B\mu_N}{2\pi\hbar^2 r^3}\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{I} \tag{11}$$

où $\hat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r}/r$, et $\boldsymbol{T}$ est un vecteur à reconstruire.

Solution: C'est vraiment très direct une fois qu'on utilise le lien entre moments magnétiques et spins, et le fait que $g_e \approx -2$ pour l'électron. On a que $\boldsymbol{T} = \boldsymbol{L} - \boldsymbol{S} + 3(\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{r}}$.

2.6

En utilisant le théorème de la projection, montrer que

$$\langle nlS; jm'_j| \otimes \langle Im'_I|\ \frac{\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{I}}{r^3}\ |nlS; jm_j\rangle \otimes |Im_I\rangle = \langle nlS; jm'_j| \otimes \langle Im'_I|\ \frac{(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T})(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{I})}{\hbar^2 j(j+1)r^3}\ |nlS; jm_j\rangle \otimes |Im_I\rangle\ . \tag{12}$$

Solution: $\boldsymbol{T}/r^3$ est un opérateur vectoriel, donc, par le théorème de la projection

$$\langle nlS; jm'_j| \otimes \langle Im'_I| \, \frac{\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{I}}{r^3} \, |nlS; jm_j\rangle \otimes |Im_I\rangle = \langle nlS; jm'_j| \, \frac{\boldsymbol{T}}{r^3} \, |nlS; jm_j\rangle \cdot \langle Im'_I|\boldsymbol{I}|Im_I\rangle$$

$$= \langle nlS; jm'_j| \, \frac{(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T})\boldsymbol{J}}{\hbar^2 j(j+1) r^3} \, |nlS; jm_j\rangle \cdot \langle Im'_I|\boldsymbol{I}|Im_I\rangle \, .$$

2.7

Montrer que

$$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T} = \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2 + 3(\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})^2 \tag{13}$$

et, sachant que $S^\mu S^\nu + S^\nu S^\mu = \hbar^2 \frac{\delta_{\mu\nu}}{2} \mathbb{1}$ $(\mu, \nu = x, y, z)$, conclure que $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T} = \boldsymbol{L}^2$.

Solution: On arrive au premier résultat simplement en utilisant le fait que $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$ et la propriété $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{r} = 0$ puisque $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$. Depuis la propriété de anticommutation des spin $S = 1/2$ on a que $3(\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})^2 = 3/4$, est aussi $\boldsymbol{S}^2 = 3/4$, d'où le résultat final.

2.8

En introduisant l'opérateur de moment cinétique total de l'atome

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{J} + \boldsymbol{I} \tag{14}$$

et en passant à la base $|nlSjI; Fm_F\rangle$ qui diagonalise $\boldsymbol{F}^2$ et F^z, montrer que le décalage hyperfin prend la forme

$$\Delta E^{(\mathrm{HF})}_{nljF} = \langle nlSjI; Fm'_F|\mathscr{H}_{\mathrm{HF}}|nlSjI; Fm_F\rangle = \delta_{m_F, m'_F} \frac{g_p \mu_0 \mu_N \mu_B}{4\pi} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \frac{[F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)]\, l(l+1)}{j(j+1)} \tag{15}$$

où le symbole $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl}$ doit être exprimé comme intégrale.

Note : en utilisant le résultat $\langle r^{-3}\rangle_{nl} = Z^3/[a_0^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)]$ on obtient la forme de la correction hyperfine qu'on a vu dans le cours.

Solution: On utilise le fait que $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{I} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{F}^2 - \boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{I}^2\right)$, et que $\boldsymbol{L}^2$ est diagonal sur les états qu'on utilise. En plus

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \int r^2 dr \frac{|\mathscr{R}_{nl}(r)|^2}{r^3}$$

où $\mathscr{R}_{nl}(r)$ est la fonction d'onde radiale des orbitales de l'atome d'hydrogène.