

SESSION 2010

**AGREGATION
CONCOURS EXTERNE**

**Section : SCIENCES PHYSIQUES
Option A : PHYSIQUE**

PROBLÈME DE PHYSIQUE

Durée : 6 heures

Calculatrice électronique de poche – y compris calculatrice programmable, alphanumérique ou à écran graphique – à fonctionnement autonome, non imprimante, autorisée conformément à la circulaire n° 99-186 du 16 novembre 1999.

L'usage de tout ouvrage de référence, de tout dictionnaire et de tout autre matériel électronique est rigoureusement interdit.

Dans le cas où un(e) candidat(e) repère ce qui lui semble être une erreur d'énoncé, il (elle) le signale très lisiblement sur sa copie, propose la correction et poursuit l'épreuve en conséquence.

De même, si cela vous conduit à formuler une ou plusieurs hypothèses, il vous est demandé de la (ou les) mentionner explicitement.

NB : Hormis l'en-tête détachable, la copie que vous rendrez ne devra, conformément au principe d'anonymat, comporter aucun signe distinctif, tel que nom, signature, origine, etc. Si le travail qui vous est demandé comporte notamment la rédaction d'un projet ou d'une note, vous devrez impérativement vous abstenir de signer ou de l'identifier.

Tournez la page S.V.P.

Préambule

Ce problème porte sur différents aspects de la structure et la dynamique de l'atome d'hydrogène. Il s'agit notamment de l'étude de son interaction avec des champs électrique et magnétique statiques ou avec le rayonnement électromagnétique. L'étude sera principalement conduite dans le cadre de la physique classique (questions A.I,B,C.I), en empruntant parfois des arguments « semi-classiques » à la mécanique quantique (notamment questions A.II,C.II,D). Seule la dernière partie (E) se place dans le cadre quantique.

De façon générale, le mouvement considéré est celui d'une particule de charge $q = -e$ et de masse m dans un champ central décrit par l'énergie potentielle de Kepler-Coulomb, que l'on écrira :

$$U(\vec{r}) = -\frac{K}{r}, \quad (1)$$

où $K = q^2/4\pi\epsilon_0$ est la constante de couplage, $\vec{r}$ le rayon-vecteur noyau-électron et $r = ||\vec{r}||$ la distance entre le noyau et l'électron. On adoptera de façon plus générale des coordonnées sphériques (r, θ, φ) centrées sur le noyau. Ce noyau sera supposé fixe à l'origine O des coordonnées.

La première partie (A) récapitule un certain nombre de résultats fondamentaux. Les quatre parties suivantes (B à E) peuvent être traitées de façon indépendante à condition d'admettre, si nécessaire, les résultats qui sont donnés dans les parties précédentes (notamment ceux de la partie B). Enfin, les trois dernières parties (C, D et E) sont totalement indépendantes l'une de l'autre.

Notations : Les quantités vectorielles sont, comme d'habitude, surmontées d'une flèche (par exemple $\vec{V}$), leur module étant désigné par la même lettre italique (V dans cet exemple), de même que leurs coordonnées, qui sont alors indexées par x, y, z en coordonnées cartésiennes, ou r, θ, φ en coordonnées sphériques (par exemple V_x ou V_θ). On notera $\vec{u}_x, \vec{u}_y$ et $\vec{u}_z$ les vecteurs unitaires de la base cartésienne, ainsi que $\vec{u}_r, \vec{u}_\theta$ et $\vec{u}_\varphi$ les vecteurs unitaire de la base locale des coordonnées sphériques. Le produit scalaire est noté $\vec{V} \cdot \vec{W}$, et le produit vectoriel $\vec{V} \wedge \vec{W}$.

On notera $\vec{p}$ l'impulsion de l'électron et $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$ le moment cinétique par rapport à l'origine. On notera $\partial G / \partial \vec{v}$ le gradient de la grandeur G par rapport au vecteur $\vec{v}$, c'est à dire le vecteur dont les composantes sont les dérivées partielles de G par rapport aux composantes de $\vec{v}$.

Le crochet de Poisson de deux grandeurs physiques f et g est défini par :

$$\{f, g\} = \sum_{i=x,y,z} \left[\frac{\partial f}{\partial r_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial r_i} \right] = \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{r}}, \quad (2)$$

et on utilisera souvent les relations :

$$\{\vec{r}, g(\vec{p})\} = \frac{\partial g}{\partial \vec{p}} \quad \text{et} \quad \{\vec{p}, g(\vec{r})\} = -\frac{\partial g}{\partial \vec{r}}. \quad (3)$$

Rappels : Dans la formulation hamiltonienne de la mécanique classique, l'évolution des variables dynamiques est obtenue à l'aide du crochet de Poisson avec le hamiltonien :

$$\frac{dG}{dt}(\vec{r}, \vec{p}) = \{G(\vec{r}, \vec{p}), \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p})\}. \quad (4)$$

Le hamiltonien $\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p})$ est généralement identifiable à l'énergie exprimée en termes de la position $\vec{r}$ et de l'impulsion $\vec{p}$ de la (ou des) particule(s) considérée(s).

À de nombreuses reprises, nous nous intéresserons à la « valeur moyenne » $\langle G \rangle$ d'une grandeur physique G . En mécanique classique, elle est définie comme la moyenne *temporelle* :

$$\langle G \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} G(t) dt \right] \quad \text{ou} \quad \langle G \rangle = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} G(t) dt \quad \text{si } G \text{ a pour période } T. \quad (5)$$

Formulaire

On donne ici quelques formules utiles ainsi que la valeur de quelques constantes fondamentales.

– Équation polaire d'une conique :

$$r(\theta) = P/(1 - e \cos \theta) \quad \text{où } P \text{ est le paramètre et } e \text{ son excentricité.} \quad (6)$$

Pour une ellipse, le demi-grand axe a et le demi-petit axe b vérifient la relation : $b^2 = a^2(1 - e^2)$.

– Formule du double produit vectoriel :

$$\vec{A} \wedge (\vec{B} \wedge \vec{C}) = (\vec{C} \wedge \vec{B}) \wedge \vec{A} = (\vec{A} \cdot \vec{C}) \vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B}) \vec{C}, \quad (7)$$

– Crochet de Poisson de produits :

$$\text{Pour } A, B, C, \text{ quelconques,} \quad \{A, BC\} = B\{A, C\} + \{A, B\}C \quad (8)$$

et

$$\text{Pour } A, \vec{B}, \vec{C} \text{ grandeurs quelconques,} \quad \{A, \vec{B} \wedge \vec{C}\} = \{A, \vec{B}\} \wedge \vec{C} + \vec{B} \wedge \{A, \vec{C}\}. \quad (9)$$

– Formules de Jacobi : Il résulte des relations précédentes :

$$\vec{A} \wedge (\vec{B} \wedge \vec{C}) + \vec{B} \wedge (\vec{C} \wedge \vec{A}) + \vec{C} \wedge (\vec{A} \wedge \vec{B}) = \vec{0}, \quad (10)$$

et

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0. \quad (11)$$

– Constantes fondamentales :

c	$=$	299 792 458	m.s^{-1}	vitesse de la lumière dans le vide,
$\hbar$	$\approx$	$1,055 \times 10^{-34}$	$\text{J} \cdot \text{s}$	constante de Planck réduite,
e	$\approx$	$1,602 \times 10^{-19}$	C	charge élémentaire (électron : $q = -e$),
m	$\approx$	$0,911 \times 10^{-30}$	kg	masse de l'électron,
μ_0	$=$	$4\pi \times 10^{-7}$	$\text{H} \cdot \text{m}^{-1}$	perméabilité magnétique du vide,
$\epsilon_0 \equiv (\mu_0 c^2)^{-1}$	$=$	$8,854 \times 10^{-12}$	$\text{F} \cdot \text{m}^{-1}$	permittivité diélectrique du vide,
$K \equiv e^2/(4\pi\epsilon_0)$	$\approx$	$230,7 \times 10^{-30}$	$\text{J} \cdot \text{m}$	constante de la loi de Coulomb
$\alpha \equiv K/(\hbar c)$	$\approx$	$7,297 \times 10^{-3}$	–	constante de structure fine, $\approx 1/137$
a_0	$\approx$	$0,529 \times 10^{-10}$	m	rayon de Bohr.

A Introduction

Le but de cette partie est de rappeler quelques résultats fondamentaux nécessaires pour la suite.

A.I Généralités sur le mouvement

- 1 Écrire la force subie par l'électron.
- 2 Donner la relation entre l'impulsion $\vec{p}$ et la vitesse $\vec{v}$ en mécanique classique.
- 3 On se limite, pour la totalité du problème, à l'étude de trajectoires *bornées*. L'énergie potentielle étant nulle à l'infini, que peut-on dire du signe de l'énergie ?
- 4 Montrer que les trois composantes de $\vec{L}$ sont des constantes du mouvement.
- 5 Indiquer sans démonstration les conséquences de cette loi de conservation.
- 6 Rappeler sans démonstration quelle est la forme des trajectoires obtenues pour le potentiel central de Kepler-Coulomb.
- 7 En considérant la dérivée temporelle du viriel $\mathcal{V} = \vec{r} \cdot \vec{p}$, établir la relation qui existe entre les valeurs moyennes de l'énergie cinétique $\langle E_c \rangle$ et de l'énergie potentielle $\langle E_p \rangle$, puis exprimer $\langle E_c \rangle$ et $\langle E_p \rangle$ en fonction de E .
Indication : On pourra commencer par démontrer que pour une fonction bornée, la valeur moyenne de sa dérivée temporelle est nulle.
- 8 On se limite ici au cas des orbites circulaires. Exprimer en fonction de l'énergie E la valeur :
 - a) du rayon r de l'orbite,
 - b) de la vitesse angulaire de rotation ω ,
 - c) du moment cinétique L .

A.II Modèle de Bohr (On ne considère ici que des orbites circulaires)

Le raisonnement présenté par N. Bohr dans son article historique de 1913 est fondé sur les trois hypothèses suivantes :

- l'existence de niveaux d'énergie quantifiés, repérés par un nombre quantique entier n ;
 - la relation de Planck-Einstein $\Delta E = \hbar \omega$, entre la fréquence ω du rayonnement émis et la diminution d'énergie ΔE qui en résulte ;
 - le principe de correspondance, selon lequel, à la limite où les niveaux d'énergie deviennent très proches, on doit retrouver la mécanique classique.
- 1 Indiquer qualitativement quel phénomène électromagnétique se produit lorsqu'une charge effectue un mouvement classique de rotation circulaire uniforme.
 - 2 Soit $E(n)$ l'énergie quantifiée du niveau n . En appliquant les hypothèses ci-dessus à la transition radiative ($n \rightarrow n - 1$) pour les grandes valeurs de n , établir l'expression de $dE(n)/dn$ en fonction de $E(n)$. En déduire, à une constante d'intégration près, la dépendance des niveaux d'énergie par rapport à n .
 - 3 On prend comme une donnée de l'expérience la formule de Balmer décrivant les longueurs d'onde λ des transitions observables, n et n' étant deux entiers naturels :

$$\lambda_{n,n'}^{-1} = \mathcal{R} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right), \quad (\text{A.1})$$

En déduire l'expression de la constante de Rydberg $\mathcal{R}$. Préciser sa valeur numérique en cm^{-1} .

- 4 Montrer que le rayon, l'énergie, la vitesse, la vitesse angulaire de rotation et le moment cinétique de l'électron sur l'orbite de Bohr de nombre quantique n valent :

$$a_n = n^2 a_0, \quad E_n = -\frac{E_0}{2 n^2}, \quad v_n = \frac{v_0}{n}, \quad \omega_n = \frac{\omega_0}{n^3}, \quad L_n = n L_0, \quad (\text{A.2})$$

et préciser l'expressions des constantes a_0 , E_0 , v_0 , ω_0 et L_0 , qui constituent « le système d'unités naturelles » de la physique atomique, en fonction des constantes fondamentales.

- 5 On complète ce système d'unité en prenant $e = |q|$ comme unité de charge.
 - a) Montrer que ce choix impose de donner à $4\pi\epsilon_0$ la valeur numérique 1.
 - b) En déduire la valeur littérale et numérique des unités atomiques de champ électrique F_0 et de champ magnétique B_0 .
 - c) Quelle est la valeur numérique de la vitesse de la lumière dans le système d'unités atomiques ? On pourra utiliser la constante de structure fine α . En déduire la valeur numérique de μ_0 dans ce système.

B La symétrie additionnelle du problème de Kepler-Coulomb

Le fait que *toutes* les trajectoires d'énergie négative soient des courbes fermées traduit l'existence d'un degré de symétrie plus élevé que la simple invariance par rotation. C'est cette symétrie que nous allons caractériser ici en mettant en évidence les quantités conservées spécifiques du potentiel en $1/r$. Elle nous servira ultérieurement pour décrire certains aspects du couplage de l'atome avec des champs électriques et magnétiques.

B.I Vecteur de Laplace

- 1 Montrer la relation cinématique (indépendante de la forme du potentiel d'interaction) :

$$\frac{d}{dt} \vec{u}_r = \frac{\vec{L}}{mr^2} \wedge \vec{u}_r. \quad (\text{B.1})$$

- 2 En déduire que, dans le cas du potentiel en $1/r$, le vecteur de Laplace (ou de Runge-Lenz) :

$$\vec{A} = \frac{\vec{L} \wedge \vec{p}}{mK} + \vec{u}_r \quad (\text{B.2})$$

est une constante du mouvement.

- 3 Évaluer $\vec{L} \cdot \vec{A}$, et indiquer l'orientation du vecteur $\vec{A}$ par rapport au plan de la trajectoire.
- 4 On suppose que l'axe Oz est aligné selon la direction de $\vec{L}$, et l'axe Ox selon $\vec{A}$. En formant $\vec{r} \cdot \vec{A}$ et en utilisant les coordonnées polaires (r, φ) dans le plan xOy , retrouver l'équation de la trajectoire. Quelle est alors l'interprétation géométrique de $\mathcal{A}$?
- 5 Évaluer le carré scalaire $\vec{A}^2$. En déduire la relation qui lie $\mathcal{A}$, L et E . Quelles sont les valeurs possibles de $\mathcal{A}^2$ dans l'hypothèse de la question A.I.3 ?
- 6 Que vaut $\vec{A}$ pour une orbite circulaire ? Que dire de la trajectoire si $\vec{L} = \vec{0}$?
- 7 En définitive, combien existe-t-il de constantes du mouvement indépendantes ? Commentaire ?
- 8 Représenter graphiquement une trajectoire, et placer les vecteurs $\vec{L}$ et $\vec{A}$ sur le dessin.
- 9 Déterminer les demi-axes a et b de la trajectoire en fonction de L et de $\mathcal{A}$. En déduire que l'énergie d'une trajectoire est déterminée par la demi-longueur du grand axe a , indépendamment de b .
- 10 En utilisant la loi des aires, obtenir l'expression de la période de révolution T . Montrer que pour une énergie donnée elle est indépendante de L . *Indication* : la surface de la trajectoire est πab .
- 11 Montrer que T peut s'exprimer en fonction de a seulement. Comment s'appelle la relation obtenue ?
- 12 On définit le « paramètre d'action » I par l'identité $I = \sqrt{mK^2/(-2E)}$. Donner son expression en termes des grandeurs L et $\mathcal{A}$.
- 13 Vérifier (sans chercher à l'établir) la relation :

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = \frac{dE(I)}{dI}. \quad (\text{B.3})$$

Montrer que la cohérence de cette expression avec l'hypothèse du § A.II.2 conduit à la « condition de quantification » $I = n\hbar$.

B.II Valeur moyenne de $\vec{r}$ et des puissances de r

- 1 Évaluer $\langle \vec{p} \rangle$, et en déduire $\langle \vec{u}_r \rangle = \vec{A}$. En déduire aussi la relation qui lie $\langle (\vec{r} \cdot \vec{p}) \vec{p} \rangle$ et $\langle p^2 \vec{r} \rangle$.
- 2 Par des arguments de symétrie, montrer que la valeur moyenne du rayon vecteur $\langle \vec{r} \rangle$ est non nulle et est colinéaire avec $\vec{A}$.
- 3 Établir la relation, dite « remplacement de Pauli » (*W.E. Pauli, 1926*) :

$$\langle \vec{r} \rangle = \frac{3K}{-4E} \vec{A}. \quad (\text{B.4})$$

Indication : calculer la dérivée temporelle de $r^2 \vec{p}$, et en utilisant le résultat de la question 1, montrer que $\langle 4 E_c \vec{r} \rangle = -\langle E_p \vec{r} \rangle = K \langle \vec{u}_r \rangle$, puis utiliser la conservation de l'énergie.

- 4 Nous aurons plus tard besoin de la valeur moyenne des puissances de r . Établir à partir des questions qui précèdent l'expression des valeurs moyennes suivantes :

$$\langle r \rangle = \frac{1}{C} \frac{3I^2 - L^2}{2}, \quad \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{C}{I^2}, \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{C^2}{I^3 L}. \quad (\text{B.5})$$

Préciser l'expression littérale de la constante C . Vérifier que sa valeur numérique dans le système international est $C = 2,1 \times 10^{-58}$.

Indication : la première formule s'obtient en utilisant le remplacement de Pauli pour écrire $\langle \vec{r} \cdot \vec{A} \rangle$. Les deux suivantes résultent de relations générales établies au A.I ; pour la troisième, on pourra utiliser le lien qui existe entre $1/r^2$ et $d\varphi/dt$.

Dans la suite du problème, on pourra utiliser les valeurs moyennes suivantes, admises sans démonstration :

$$\langle r^2 \rangle = C^2 I^2 \frac{5I^2 - 3L^2}{2}, \quad \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{C^3}{I^3 L^3}, \quad \left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle = C^4 \frac{3I^2 - L^2}{2I^5 L^5}. \quad (\text{B.6})$$

B.III Vecteur de Laplace réduit et générateurs de Pauli

(introduits par *W.E. Pauli* dans son article historique de 1926)

- 1 Pour ce qui suit, il est commode de faire un changement d'échelle sur le vecteur de Laplace, en posant :

$$\vec{A} = I \vec{A} \quad (\text{B.7})$$

- a) Justifier le fait que le « vecteur de Laplace réduit » $\vec{A}$ soit encore une constante du mouvement. Quelle est sa dimension ?
- b) Donner la nouvelle expression de I et de E en fonction de L , A et des constantes m et K .

- 2 Montrer que pour un vecteur constant $\vec{u}$ quelconque :

$$\{(\vec{L} \cdot \vec{u}), \vec{p}\} = \vec{p} \wedge \vec{u} \quad \text{et de même} \quad \{(\vec{L} \cdot \vec{u}), \vec{r}\} = \vec{r} \wedge \vec{u}. \quad (\text{B.8})$$

Indication : utiliser les propriétés du produit mixte pour mettre $\vec{L} \cdot \vec{u}$ sous une forme où l'évaluation du gradient est élémentaire.

- 3 En déduire le crochet de Poisson (pour $\vec{u}$ et $\vec{v}$ constants quelconques) :

$$\{(\vec{L} \cdot \vec{u}), \vec{L}\} = \vec{L} \wedge \vec{u} \quad \text{et} \quad \{(\vec{L} \cdot \vec{u}), (\vec{L} \cdot \vec{v})\} = (\vec{u} \wedge \vec{v}) \cdot \vec{L}. \quad (\text{B.9})$$

Indication : utiliser la relation de Jacobi, puis le produit mixte pour la seconde identité.

Cette propriété, qui résulte de la structure même du groupe SO_3 des rotations de l'espace, constitue la **définition** générale d'un **moment cinétique**.

On *admettra* (calcul laborieux mais sans difficulté de principe) que les crochets de Poisson pour $\vec{A}$ sont donnés par des relations très analogues :

$$\{\vec{L} \cdot \vec{u}, \vec{A} \cdot \vec{v}\} = (\vec{u} \wedge \vec{v}) \cdot \vec{A} \quad \text{et} \quad \{\vec{A} \cdot \vec{u}, \vec{A} \cdot \vec{v}\} = (\vec{u} \wedge \vec{v}) \cdot \vec{L}. \quad (\text{B.10})$$

- 4 On introduit les deux générateurs de Pauli : $\vec{J}_1 = (\vec{L} + \vec{A})/2$ et $\vec{J}_2 = (\vec{L} - \vec{A})/2$.
 - a) En utilisant exclusivement les relations (B.9) et (B.10), montrer que $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ vérifient les relations caractéristiques d'un moment cinétique.
 - b) Vérifier de même que les crochets de Poisson des composantes de $\vec{J}_1$ avec celles de $\vec{J}_2$ sont systématiquement nuls.
 - c) Exprimer l'énergie en fonction de $\vec{J}_1$ et de $\vec{J}_2$, ainsi que des constantes fondamentales. Montrer que l'on peut l'écrire aussi en fonction de $\vec{J}_1$ ou de $\vec{J}_2$ seulement. En déduire que ces deux moments cinétiques sont des constantes du mouvement.
 - d) Montrer que $J_1 = J_2 = I/2$.

C Effets perturbatifs

Différents effets physiques peuvent affecter le mouvement de Kepler, en introduisant des corrections au potentiel $U(r)$. Ces corrections, statiques ou lentement variables, tant quelles restent faibles, vont simplement induire une évolution lente des orbites. Cette évolution est dite « séculaire » dans la mesure où elle est négligeable à l'échelle d'une révolution (échelle annuelle dans l'image planétaire), mais ne l'est plus à des échelles de temps plus importantes. Il s'ensuit que les variables dynamiques $\vec{L}$ et $\vec{A}$ ne seront plus exactement des constantes.

Pour étudier cette évolution, on considère des valeurs moyennes prises sur un temps τ tel que $T \ll \tau \ll T_s$, où T est la période non perturbée, et T_s l'échelle de temps de l'évolution séculaire. A cette échelle de temps, l'évolution est régie par la perturbation $V = \mathcal{H} - \mathcal{H}_0$, où $\mathcal{H}_0$ est le hamiltonien non perturbé et $\mathcal{H}$ le hamiltonien total. On peut montrer qu'à l'ordre le plus bas, l'évolution séculaire de chaque constante du mouvement non perturbé G est donnée par :

$$\left. \frac{dG}{dt} \right|_{\text{sec}} = \{G, \langle V \rangle\} = \{G, W\}, \quad (\text{C.1})$$

où la valeur moyenne $W = \langle V \rangle$ est évaluée sur le mouvement *non perturbé*.

C.I Champs électrique et magnétique extérieurs (W.E. Pauli, 1926)

On se propose d'appliquer la méthode exposée ci-dessus pour décrire l'interaction d'un atome d'hydrogène classique avec des champs électrique ou magnétique $\vec{F}$ et $\vec{B}$ supposés uniformes et constants, et suffisamment faibles pour pouvoir être traités en perturbation.

- 1 En comparant les ordres de grandeur, dans le cadre du modèle de Bohr, des forces dues à la perturbation et de la force de Coulomb, discuter les conditions pour que les champs $\vec{F}$ et $\vec{B}$ puissent être considérés comme faibles. On exprimera ces conditions en termes de n , F_0 et B_0 .
- 2 On rappelle qu'en mécanique classique, une distribution de charge $\rho(\vec{r})$ et de masse $\mu(\vec{r})$, telle que le rapport ρ/μ soit indépendant de la position $\vec{r}$, animée d'un mouvement de rotation quelconque, est dotée d'un moment magnétique $\vec{M}$ proportionnel à son moment cinétique $\vec{L}$:

$$\vec{M} = \gamma \vec{L} \quad \text{où} \quad \gamma = \frac{Q}{2M}, \quad (\text{C.2})$$

où γ est appelé *facteur gyromagnétique*, Q et M étant respectivement la charge et la masse totales. En déduire l'expression de l'énergie potentielle d'interaction W_m d'un atome d'hydrogène avec un champ magnétique $\vec{B}$ uniforme permanent.

- 3 Comment s'écrit l'énergie potentielle d'interaction de l'atome avec un champ électrique $\vec{F}$ uniforme et constant ?
- 4 En déduire l'expression de l'énergie d'interaction électrique moyenne W_e en fonction du vecteur $\vec{A}$.

- 5 Supposons que l'atome interagit simultanément avec un champ électrique et un champ magnétique.
a) Montrer que l'on peut mettre la perturbation moyenne sous la forme :

$$W(\vec{L}, \vec{A}) = \vec{\Omega}_B \cdot \vec{L} + \vec{\Omega}_F \cdot \vec{A}, \quad (\text{C.3})$$

et préciser l'expression des deux vecteurs rotation $\vec{\Omega}_B$ et $\vec{\Omega}_F$.

- b) En déduire les équations d'évolution séculaire de $\vec{L}$ et de $\vec{A}$.
c) Donner l'ordre de grandeur des fréquences $\Omega_B/2\pi$ et $\Omega_F/2\pi$ pour $n = 25$, $F = 3 \text{ kV} \cdot \text{m}^{-1}$ et $B = 0,1 \text{ T}$. Les comparer avec la fréquence $\omega/2\pi$ du mouvement keplerien.
d) Vérifier que la variable d'action I n'est pas affectée par le mouvement séculaire.
- 6 Dans le cas d'un champ $\vec{B}$ seul, montrer que l'on retrouve la précession de Larmor usuelle. Représenter sur un schéma l'évolution de $\vec{L}$ et de $\vec{A}$.
- 7 On considère ici le cas du champ électrique $\vec{F}$ seul.
a) Comment s'écrivent les équations du mouvement de $\vec{L}$ et de $\vec{A}$?
b) On suppose maintenant — ainsi que pour c) et d) ci-dessous — que $\vec{F} \propto \vec{u}_x$ et $\vec{L} \propto \vec{u}_z$. Montrer que la trajectoire reste plane et que deux des composantes de $\vec{A}$ restent constantes.
c) En utilisant les équations d'évolution de la question a), écrire, puis résoudre le système d'équations différentielles régissant l'évolution de L_z et de la composante variable de $\vec{A}$. Représenter graphiquement l'évolution temporelle de $\vec{A}$.
d) Dessiner enfin l'allure de la trajectoire électronique à différents instants convenablement choisis.
- 8 On considère maintenant des champs $\vec{B}$ et $\vec{F}$ simultanés, de directions arbitraires. Montrer que l'utilisation des vecteurs de Pauli $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ (cf. B.III.4) permet de découpler les équations du mouvement. Préciser les vecteurs rotations $\vec{\Omega}_1$ et $\vec{\Omega}_2$ correspondants.
- 9 On suppose que les champs $\vec{B}$ et $\vec{F}$ sont lentement variables. Grâce au découplage, on peut raisonner sur un seul des deux vecteurs $\vec{J}_1$ ou $\vec{J}_2$, en omettant les indices. On note $\vec{\Omega} = \Omega \vec{u}$ et on suppose que le vecteur unitaire $\vec{u}$ évolue lentement. On se propose de montrer que $J_{\parallel} = \vec{J} \cdot \vec{u}$ est un « invariant adiabatique », c'est à dire qu'il est quasi-constant avec une très bonne approximation.
a) Montrer que la norme J reste constante, quelle que soit l'évolution de $\vec{\Omega}$.
b) Justifier l'identité $d\vec{u}/dt = \vec{\omega} \wedge \vec{u}$, et exprimer $dJ_{\parallel}/dt$ en fonction de $\vec{J}_{\perp} = \vec{J} - J_{\parallel} \vec{u}$, $\vec{\omega}$ et $\vec{u}$.
c) Montrer que la valeur moyenne (sur une période du mouvement de précession) de $\vec{J}_{\perp}$ est d'ordre ω et conclure.
d) Quand l'évolution de $\vec{\Omega}$ est-elle « lente » ? Décrire qualitativement le mouvement de $\vec{J}$.

C.II États de Rydberg du Lithium

(N. Bohr, 1923)

La structure électronique des éléments alcalins (1^{re} colonne de la classification périodique) est formée d'un « cœur » ionique de charge $+e$, relativement petit et isotrope, analogue à un atome de gaz rare, et d'un électron périphérique plus faiblement lié. Lorsque cet électron est excité dans des états de $n = 10$ ou plus (états de Rydberg), le potentiel « vu » par l'électron est très proche de celui de Kepler, et le spectre proche de celui de l'hydrogène. Il subsiste néanmoins des corrections dues à la structure du cœur qui viennent modifier le potentiel d'interaction $U(r)$.

Nous nous plaçons dans tout ce paragraphe dans un cadre *semi-classique* où $I = n\hbar$ et $L = \ell\hbar$. Nous nous intéressons aux états de Rydberg de faible moment angulaire soit : $n \geq 10 \gg \ell \in [0,5]$.

- 1 Soit R le rayon caractéristique du cœur. En calculant la distance minimale s'approche d'une trajectoire de L et I donnés, donner la condition pour que l'orbite ne pénètre pas dans le cœur. Application numérique avec $R = 70 \text{ pm}$ pour le cœur héliumöide du Lithium Li^+ : à partir de quelle valeur de ℓ les effets liés à la pénétration de l'électron dans le cœur peuvent-ils être négligés ?

On se place dans ce cadre pour ce qui suit. Il subsiste néanmoins une correction due à l'interaction à distance entre le cœur atomique et l'électron périphérique, que nous allons modéliser.

- 2 On suppose que le champ électrostatique $\vec{E}$ créé par l'électron induit dans le cœur un dipôle électrique $\vec{d} = \epsilon_0 \alpha_D \vec{E}$. On rappelle que, dans ce cas, l'énergie d'interaction du dipôle avec le champ s'écrit : $V_{\text{pol}} = -\vec{d} \cdot \vec{E}/2$.

a) Donner la dimension et l'ordre de grandeur de la polarisabilité dipolaire α_D .

b) Montrer que cet effet de polarisation se traduit par un potentiel d'interaction additionnel de la forme :

$$V_{\text{pol}}(r) = -\frac{K'}{r^4} . \quad (\text{C.4})$$

et donner la valeur littérale de la constante K' . Quel est son ordre de grandeur ?

- 3 Nous allons, dans cette question et la suivante, étudier le déplacement des niveaux d'énergie quantifiés E_n sous l'effet de la perturbation $W = \langle V_{\text{pol}} \rangle$. Ce déplacement résulte de la prise en compte de W dans le hamiltonien, et s'écrit donc $\delta E = \langle W \rangle$, évalué dans l'état (n, ℓ) considéré.

a) Comment s'écrit le déplacement énergétique du niveau d'énergie E_n en fonction de n et ℓ ?

b) En 1885, Rydberg a proposé l'expression suivante des fréquences rayonnées par les atomes alcalins :

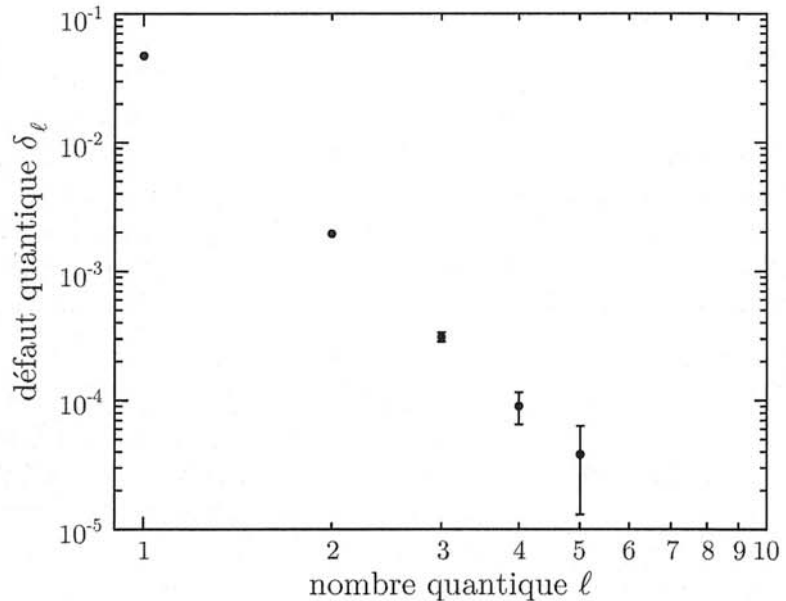
$$\frac{\Omega_{n,n'}}{2\pi} = c \mathcal{R} \left(\frac{1}{(n-\delta)^2} - \frac{1}{(n'-\delta')^2} \right) , \quad (\text{C.5})$$

où les « défauts quantiques » δ et δ' sont essentiellement fonction de ℓ pour $\ell \ll n$.

En faisant un développement limité en $\delta/n \ll 1$, faire le lien avec la question précédente, et en déduire l'expression de δ en fonction de ℓ , α_D et a_0 .

	ℓ	δ_ℓ
S	0	0,400
P	1	0,047 18
D	2	0,001 95
F	3	0,000 31
G	4	0,000 090
H	5	0,000 038

Fig. C.1 – Valeurs expérimentales approchées des défauts quantique du lithium en fonction du nombre quantique ℓ .



- 4 On donne sur la figure C.1 les valeurs de δ mesurées sur le lithium pour n assez grand, ainsi que leur représentation graphique pour $\ell \in [1, \dots, 5]$ en échelle log-log (décimal).
- a) Vérifier à l'aide des données que δ varie comme ℓ^s et déterminer la valeur de s .
- b) Comparer avec la valeur attendue. Comment peut-on interpréter les déviations observées ?
- c) Obtenir une valeur approchée de α_D , et comparer avec l'ordre de grandeur attendu.
- d) Pourquoi le cas $\ell = 0$ ne figure-t-il pas sur ce diagramme ?
- 5 Que peut-on dire de l'évolution séculaire de $\vec{L}$? Montrer que les décalages en énergie résultant de l'effet de polarisation « correspondent » aux fréquences d'évolution séculaire de $\vec{A}$.

D Émission spontanée

On se propose dans cette partie d'étudier le rayonnement électromagnétique émis par l'électron dans son mouvement autour du noyau, phénomène appelé « émission spontanée », puis les modifications du mouvement qui en résultent. On utilise pour cela l'approximation semi-classique, valide pour n et ℓ grands. Dans cette approche, on traite tous les phénomènes classiquement, et la quantification n'est introduite qu'à la fin des calculs, en utilisant les hypothèses de Bohr (*cf.* question A.II). En outre, on admet avec A. Sommerfeld que le « photon » émis emporte non seulement un quantum d'énergie $\hbar\omega$, mais aussi un quantum de moment cinétique $\hbar$.

On s'intéresse dans un premier temps aux orbites circulaires, qui se prêtent à un calcul direct de la puissance rayonnée. Le cas des orbites elliptiques nécessite l'introduction de la force de réaction de rayonnement d'Abraham-Lorentz, que nous traitons ensuite.

D.I Rayonnement dipolaire

On rappelle l'expression, en coordonnées sphériques, de l'amplitude complexe des champs électrique $\vec{\mathcal{E}}$ et magnétique $\vec{\mathcal{B}}$ rayonnés par un dipôle $\vec{d}$ aligné selon la direction Oz et oscillant à la fréquence angulaire ω , avec une amplitude complexe $\underline{d}$:

$$\vec{\mathcal{E}} \approx \frac{\underline{d} e^{-ikr}}{4\pi\epsilon_0 c^2} \frac{\omega^2}{r} \sin\theta \vec{u}_\theta \quad \text{et} \quad \vec{\mathcal{B}} \approx \frac{\mu_0 \underline{d} e^{-ikr}}{4\pi c} \frac{\omega^2}{r} \sin\theta \vec{u}_\varphi \quad (\text{D.1})$$

Le dipôle et les champs réels sont donnés par :

$$\vec{d}(t) = \text{Re}(\underline{d} e^{i\omega t} \vec{u}_z), \quad \vec{E}(\vec{r}, t) = \text{Re}(\vec{\mathcal{E}} e^{i\omega t}) \quad \text{et} \quad \vec{B}(\vec{r}, t) = \text{Re}(\vec{\mathcal{B}} e^{i\omega t}).$$

- 1 Quelles sont les approximations faites pour obtenir ces expressions des champs ?
- 2 Vérifier que les ordres de grandeur fournis par le modèle de Bohr sont compatibles avec ces hypothèses. *Indication* : exprimer $\lambda_0/2\pi = c/\omega_0$ en fonction de a_0 et de α .
- 3 Comment s'écrit le vecteur Poynting moyen $\langle \vec{\Pi}(\vec{r}) \rangle$ en fonction des amplitudes complexes des champs ?
- 4 Quelle est, dans cette situation, la puissance moyenne rayonnée $\mathcal{P}$?
On donne les intégrales angulaires :

$$\int \sin^2\theta \, d\Omega = 2 \int \cos^2\theta \, d\Omega = 8\pi/3.$$

D.II Émission d'un « état circulaire »

On considère que l'électron, sur son orbite circulaire de rayon a décrite à la vitesse angulaire ω , émet le même rayonnement qu'un dipôle tournant $\vec{d} = qa \vec{u}_r$. On suppose que le plan de l'orbite est xOy .

- 1 En supposant que le dipôle est dans la direction de l'axe Ox à $t = 0$, donner l'expression des amplitudes complexes $\underline{d}_1$ de la composante du dipôle selon Ox et de la composante $\underline{d}_2$ du dipôle selon Oy .
- 2 En déduire que le vecteur de Poynting moyen $\langle \vec{\Pi} \rangle$ est la somme $\langle \vec{\Pi}_1 \rangle + \langle \vec{\Pi}_2 \rangle$ des vecteurs de Poynting moyens associés à ces deux dipôles.
- 3 Exprimer la puissance totale moyenne rayonnée $\mathcal{P}$ en fonction de a et des constantes fondamentales. En déduire que la loi d'évolution de l'énergie mécanique E s'écrit :

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} \alpha^3 E_0 \omega_0 \left(\frac{a_0}{a} \right)^4. \quad (\text{D.2})$$

- 4 On cherche à résoudre cette équation.
 - a) En supposant que l'énergie varie très lentement, établir l'équation d'évolution séculaire du rayon a de l'orbite.
 - b) Intégrer cette équation et montrer que le résultat est compatible avec l'approximation séculaire.
- 5 On peut définir la « durée de vie radiative » de l'état circulaire comme l'intervalle de temps τ_n nécessaire pour passer de $a = a_n$ à $a = a_{n-1}$.
 - a) Donner l'expression de τ_n en fonction de l'unité atomique de pulsation ω_0 , de α et de n .
 - b) AN : évaluer la durée de vie radiative d'un état circulaire de $n = 2$ et de $n = 30$.
- 6 Montrer que l'on peut écrire :

$$\tau_n^{-1} = P_n / \hbar \omega_n . \quad (D.3)$$

Interpréter ce résultat en relation avec la question A.II.2.

- 7 On s'intéresse maintenant au cas général d'une orbite elliptique.
 - a) Montrer que le rayonnement se produit à plusieurs fréquences que l'on précisera.
 - b) Dans une approche semi-classique et à la limite $n \gg 1$, à quoi correspondent ces différentes fréquences ? On pourra s'appuyer sur le diagramme des niveaux d'énergie présenté dans la figure D.1 ci-contre.
 - c) Quelle est, dans ce contexte, la particularité de l'état circulaire mise en évidence à la question précédente ?
 - d) Comment pourrait-on généraliser l'équation (D.3) aux orbites elliptiques ? Commentaire ?

D.III Force de réaction de rayonnement

- 1 Une autre approche de la puissance rayonnée est fournie en introduisant la force de réaction de rayonnement d'Abraham-Lorentz, proportionnelle à la dérivée *troisième* de la position :

$$\vec{\mathcal{F}}_{AL} = m \tau_{AL} \frac{d^3 \vec{r}}{dt^3} \quad \text{où} \quad \tau_{AL} = \frac{2}{3} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 mc^3} , \quad (D.4)$$

qui rend compte de l'action du champ rayonné par l'électron sur lui-même.

- a) Vérifier que cette expression a bien la dimension d'une force, et comparer son ordre de grandeur à celui de la force de Coulomb.
- b) En faisant une intégration par parties, montrer que la puissance moyenne associée à la force de réaction de rayonnement $\vec{\mathcal{F}}_{AL}$ est proportionnelle à la valeur moyenne du carré de l'accélération $\langle (d^2 \vec{r}/dt^2)^2 \rangle$ (formule de Larmor). Retrouver ainsi l'expression de la puissance rayonnée $\mathcal{P}$ pour le mouvement circulaire obtenue à la question D.II.3
- 2 En utilisant les expressions établies ou admises au B.II, calculer la puissance moyenne rayonnée $P_{n,\ell}$ sur une orbite elliptique de paramètres $I = n\hbar$ et $L = \ell\hbar$. Comparer cette puissance à celle rayonnée sur l'orbite circulaire de même énergie.

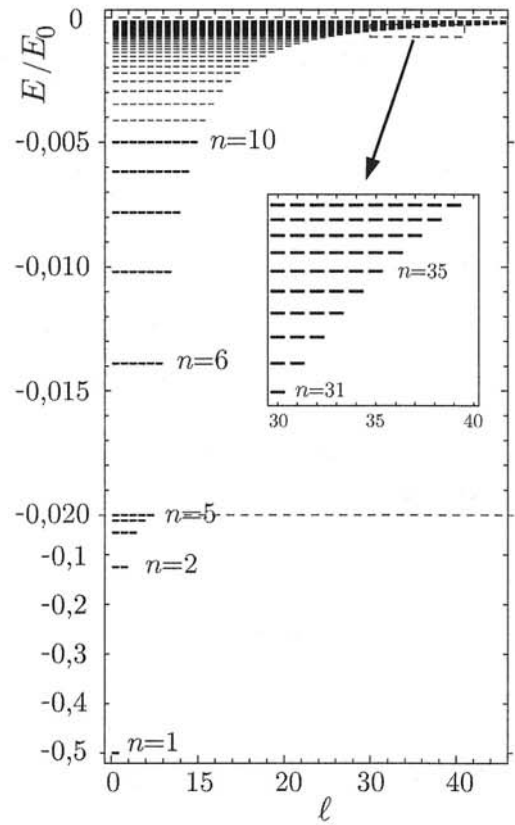


Fig. D.1 – Les niveaux d'énergie de l'hydrogène, qui seront établis au § E.I. En abscisse, le nombre quantique ℓ , en ordonnée, l'énergie associée à n . Noter le changement d'échelle verticale au niveau de $n = 5$. En insert, un zoom sur les niveaux de Rydberg.

- 3 L'expression de la puissance rayonnée obtenue à la question précédente ne permet pas de déduire facilement la durée de vie $\tau_{n,\ell}$ de l'orbite elliptique de nombres quantiques n et ℓ . On peut en revanche y accéder en considérant la variation temporelle du moment cinétique de l'électron.
- a) Calculer le couple moyen $\langle \vec{F} \rangle$ exercé sur l'électron par la force $\vec{F}_{\text{AL}}$.
Indication : En considérant la valeur moyenne de $d(\vec{r} \wedge \vec{r})/dt$, montrer que $\langle \vec{F} \rangle \propto \langle \vec{L}/r^3 \rangle$.
- b) En déduire l'équation donnant l'évolution séculaire de $\vec{L}$.
- 4 Justifier par un argument semi-classique l'égalité (approchée) (Marxer et Spruch, 1991) :

$$\tau_{n,\ell}^{-1} = \frac{|\langle \Gamma_{n,\ell} \rangle|}{\hbar}. \quad (\text{D.5})$$

- 5 En déduire l'expression de la durée de vie d'un état correspondant à une orbite elliptique. Retrouve-t-on celle de l'état circulaire ? Commentaire ?
- 6 En combinant les équations d'évolution obtenues en 2 et 3 avec celle de B.I.5, étudier l'évolution séculaire de $\vec{A}$. Commentaire ?
- 7 Dans le spectre de certains nuages intergalactiques principalement composés d'hydrogène, on observe une contribution très élevée des transitions où n diminue seulement d'une unité, sous la forme d'une cascade $n \rightarrow n-1 \rightarrow n-2 \rightarrow \dots \rightarrow n-p$, où $n \sim 200$ et $p \sim 20$.
- a) En quoi cette observation est-elle *a priori* surprenante ?
- b) En s'appuyant sur les questions précédentes et sur les observations de la question D.II.7, proposer une interprétation de ce phénomène. On pourra à nouveau utiliser le diagramme des niveaux proposé à la question D.II.

E L'atome d'hydrogène en mécanique quantique

On se propose ici de reprendre certains des résultats précédents dans le cadre formel de la mécanique quantique, plus rigoureux que le modèle semi-classique utilisé jusqu'ici. Nous verrons notamment que la plupart des résultats établis précédemment dans le cadre classique subsistent malgré l'abandon de la notion de trajectoire. Nous utiliserons le formalisme des générateurs de Pauli pour établir de façon rigoureuse le spectre de l'atome d'hydrogène, puis pour mettre en évidence des états « quasi-classiques » et étudier leur réalisation expérimentale.

Quelques rappels et précisions

- Nous utiliserons la notation $\hat{G}$ pour représenter l'opérateur quantique (appelé « observable ») associé à la grandeur classique G . À titre d'exemple fondamental, le hamiltonien quantique est obtenu à partir de sa version classique :

$$\mathcal{H}_0 = \vec{p}^2/2m - K/r \quad \rightarrow \quad \hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m - K/\hat{r}. \quad (\text{E.1})$$

- Les crochets de Poisson sont remplacés par les commutateurs, notés $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.
- On a notamment les relations de commutation canoniques :

$$[\hat{r}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \delta_{jk} \quad \text{pour } j, k \in (x, y, z)$$

où δ_{jk} est le symbole de Kronecker, qui vaut 1 si $j = k$ et 0 sinon.

- Il en résulte que les commutateurs vérifient exactement les mêmes relations (8), (9), (10) et (11) que les crochets de Poisson, et on démontre de même les relations analogues à (4) :

$$[\hat{r}, f(\hat{p})] = i\hbar \frac{\partial f(\hat{p})}{\partial \hat{p}} \quad \text{et} \quad [\hat{p}, g(\hat{r})] = -i\hbar \frac{\partial g(\hat{r})}{\partial \hat{r}}, \quad (\text{E.2})$$

valables pour toutes fonctions f et g scalaires, respectivement indépendantes de $\hat{r}$ et de $\hat{p}$.

– On définit la valeur moyenne de $\hat{G}$ dans l'état $|\psi\rangle$ par :

$$\langle \hat{G} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{G} | \psi \rangle$$

– Un moment cinétique est *par définition* un opérateur vectoriel $\hat{\mathbf{J}}$ vérifiant les relations de commutation :

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z \text{ et celles déduites des permutations circulaires de } (x, y, z), \quad (\text{E.3})$$

ou de façon équivalente $\hat{\mathbf{J}} \wedge \hat{\mathbf{J}} = i\hbar \hat{\mathbf{J}}$. En outre, la diagonalisation simultanée de $\hat{J}^2$ et d'une composante $\hat{J}_z$ définit des états notés $|j, m\rangle$, où les nombres quantiques $j \geq 0$ et $m \in [-j, j]$ sont simultanément entiers ou demi-entiers, et vérifient :

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1) \hbar^2 |j, m\rangle \text{ et } \hat{J}_z |j, m\rangle = m \hbar |j, m\rangle. \quad (\text{E.4})$$

E.I La symétrie du problème de Kepler en mécanique quantique

Les propriétés de symétrie liées au vecteur de Laplace peuvent être mise à profit en mécanique quantique, et permettent notamment d'obtenir les états stationnaires de l'atome d'hydrogène de façon purement algébrique, sans écrire l'équation de Schrödinger (*W.E. Pauli, 1926*).

On va dans un premier temps (questions 1 et 2) établir des relations fondamentales et intéressantes pour la suite. De nombreuses relations de commutation sont des pendants quantiques exacts des crochets de Poisson obtenus au B.III, et on les admettra donc sans démonstration à la question (3). Les résultats spécifiquement quantiques seront ensuite dégagés dans les questions (4) et (5).

1 Moment cinétique

- a) Pourquoi le moment cinétique $\hat{\mathbf{L}}$ est-il indifféremment donné par $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \wedge \hat{\mathbf{p}}$ ou $\hat{\mathbf{L}} = -\hat{\mathbf{p}} \wedge \hat{\mathbf{r}}$? Vérifier à l'aide du produit mixte que $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = 0$ et de même $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = 0$.
- b) En utilisant les relations sur les produits et (E.2), montrer que :

$$[\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{r}}] = i\hbar \hat{\mathbf{r}} \wedge \hat{\mathbf{u}} \text{ et de même } [\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \hat{\mathbf{p}} \wedge \hat{\mathbf{u}}. \quad (\text{E.5})$$

- c) On pourrait montrer – *et nous admettrons* – que pour toute fonction vectorielle $\hat{\mathbf{V}}$ de $\hat{\mathbf{r}}$ et de $\hat{\mathbf{p}}$, on a la relation analogue :

$$[\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{V}}] = i\hbar \hat{\mathbf{V}} \wedge \hat{\mathbf{u}}. \quad (\text{E.6})$$

L'application de cette identité à $\hat{\mathbf{L}}$ lui-même confirme qu'il vérifie les relations de commutation caractéristiques d'un moment cinétique.

En déduire que :

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{V}}] = i\hbar (\hat{\mathbf{V}} \wedge \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \wedge \hat{\mathbf{V}}). \quad (\text{E.7})$$

- d) Quelle est la définition quantique d'une « constante du mouvement » $\hat{C}$? Montrer que cela équivaut à la relation $[\hat{C}, \hat{H}] = 0$ où $\hat{H}$ est le hamiltonien.

- e) Montrer que pour le hamiltonien $\hat{H}_0$ donné par l'équation (E.1), $\hat{\mathbf{L}}$ est une constante du mouvement. *Indication* : à l'aide des résultats précédents, montrer que $[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{p}}^2] = [\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{r}}^2] = [\hat{\mathbf{L}}, 1/\hat{r}] = 0$.

2 Vecteur de Laplace

- a) Justifier la définition suivante du vecteur de Laplace en mécanique quantique :

$$\hat{\mathbf{A}} = \left(\frac{\hat{\mathbf{L}} \wedge \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \wedge \hat{\mathbf{L}}}{2mK} + \frac{\hat{\mathbf{r}}}{\hat{r}} \right). \quad (\text{E.8})$$

- b) Vérifier que l'on a toujours $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = 0$.

c) Montrer que le vecteur de Laplace $\hat{\vec{A}}$ est une constante du mouvement. *Indication* : On admettra que :

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{\vec{u}}_r \right] = \frac{1}{2mr^2} \left[\hat{L}^2, \hat{\vec{u}}_r \right] \quad (\text{E.9})$$

et on calquera autant que possible la suite du calcul sur le calcul classique correspondant (§ B.I.2).

3 Vecteur de Laplace réduit et générateurs de Pauli

On admet maintenant l'ensemble des résultats quantiques analogues à ceux de la partie B.III :

- On définit le vecteur de Laplace réduit par :

$$\hat{\vec{A}} = \hat{I} \hat{\vec{A}} \quad \text{où} \quad \hat{I} = (-2\hat{H}_0/mK^2)^{-1/2}, \quad (\text{E.10})$$

l'opérateur $\hat{I}$ étant défini par la quantité correspondante dans chaque niveau d'énergie.

- Relations de commutation :

$$[\hat{L} \cdot \vec{u}, \hat{\vec{A}} \cdot \vec{v}] = i\hbar (\vec{u} \wedge \vec{v}) \cdot \hat{\vec{A}}, \quad (\text{E.11})$$

$$[\hat{\vec{A}} \cdot \vec{u}, \hat{\vec{A}} \cdot \vec{v}] = i\hbar (\vec{u} \wedge \vec{v}) \cdot \hat{\vec{L}}, \quad (\text{E.12})$$

- Les générateurs $\hat{J}_1 = (\hat{L} + \hat{\vec{A}})/2$ et $\hat{J}_2 = (\hat{L} - \hat{\vec{A}})/2$ sont des moments cinétiques qui commutent.

- L'évaluation du carré de $\hat{\vec{A}}$ conduit à la relation :

$$\hat{I}^2 = \frac{mK^2}{-2\hat{H}_0} = (\hat{L}^2 + \hat{\vec{A}}^2 + \hbar^2). \quad (\text{E.13})$$

- On a l'identité entre opérateurs :

$$\frac{\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{A}} + \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{r}}}{2} = \hat{r} - \frac{\hat{L}^2 + \frac{3}{2}\hbar^2}{mK}. \quad (\text{E.14})$$

a) Quelle est, qualitativement, l'origine du $\hbar^2$ dans les deux équations ci-dessus ? Comment le principe de correspondance se manifeste-t-il ?

b) Montrer que l'on a encore $\hat{J}_1^2 = \hat{J}_2^2$, et relier cette valeur à celle de $\hat{I}$.

4 Spectre de l'hydrogène

a) Dédire ce qui précède que l'on peut diagonaliser simultanément $\hat{H}_0$, $\hat{J}_1^2$, $\hat{J}_2^2$, $\hat{J}_1 \cdot \vec{u}_1$ et $\hat{J}_2 \cdot \vec{u}_2$ (où $\vec{u}_1$ et $\vec{u}_2$ sont des vecteurs unitaires de directions quelconques).

b) Quels sont les valeurs propres et états propres des opérateurs $\hat{J}_1^2$, $\hat{J}_2^2$, $\hat{J}_1 \cdot \vec{u}_1$ et $\hat{J}_2 \cdot \vec{u}_2$?

c) Exprimer les valeurs propres de $\hat{H}_0$ en fonction du nombre quantique j associé aux $\hat{J}_{1,2}^2$. Montrer que l'on obtient ainsi de façon rigoureuse le spectre d'énergie de l'atome d'hydrogène en mécanique quantique et exprimer le nombre quantique principal n en fonction de j .

d) Préciser combien de nombres quantiques sont nécessaires pour spécifier un unique état quantique, et en déduire que l'on peut le désigner sans ambiguïté par la notation $|j, m_1, m_2\rangle$.

e) Quelle est la dégénérescence des niveaux d'énergie ?

5 États paraboliques

On se place dans cette question dans le cas particulier où $\vec{u}_1 = \vec{u}_2 = \vec{u}_z$.

a) Préciser de quelles observables, parmi les composantes et les modules de $\hat{\vec{L}}$ et $\hat{\vec{A}}$, les états $|j, m_1, m_2\rangle$ correspondants sont des vecteurs propres ?

b) Construire, pour $n = 4$, un diagramme où chaque état $|j, m_1, m_2\rangle$ est représenté par un point dont l'abscisse est la valeur de $m = \hat{L}_z/\hbar$ et l'ordonnée celle de $k = \hat{A}_z/\hbar$.

c) Déterminer quelle est, pour une énergie donnée, la plus grande valeur possible de la valeur propre de $\hat{L}_z$. En déduire la valeur maximale du nombre quantique ℓ associé à $\hat{L}^2$.

d) Identifier les états qui correspondent le mieux aux orbites circulaires de Bohr, désignés comme « états circulaires ». Commenter la valeur de ℓ à laquelle ils correspondent.

E.II États de fluctuations minimales d'un moment cinétique

On fait ici une brève digression sur les propriétés de certains états d'un moment cinétique générique $\hat{J}$, dont l'application à $\hat{J}_1$ et $\hat{J}_2$ au paragraphe suivant permettra de construire une classe d'états intéressants de l'atome d'hydrogène.

On peut montrer, et on admettra ici, que les relations de commutation caractéristiques (E.3) se traduisent par une inégalité de type "Heisenberg" de la forme (noter le carré scalaire du vecteur dans la valeur moyenne) :

$$\Delta J^2 \equiv \langle (\hat{J} - \langle \hat{J} \rangle)^2 \rangle \geq j\hbar^2. \quad (\text{E.15})$$

Nous allons simplement déterminer les états qui réalisent les fluctuations *minimales*.

- 1 On considère tout d'abord un état $|j, m\rangle$ du moment cinétique.
 - a) Calculer les valeurs moyennes des 3 composantes du moment cinétique $\langle \hat{J}_i \rangle = \langle j, m | \hat{J}_i | j, m \rangle$ pour $i = x, y, z$. En déduire la valeur de $\langle \hat{J} \rangle$.
Indication : évaluer de deux façons la valeur moyenne du commutateur $[J_x, J_z]$.
 - b) En déduire que l'on a :

$$\Delta J^2 = (j(j+1) - m^2) \hbar^2, \quad (\text{E.16})$$

et déterminer les valeurs de m qui réalisent le minimum de ΔJ^2 .

- 2 On considère maintenant un état propre commun de $\hat{J}^2$ et $\hat{J} \cdot \vec{u}$, noté $|j, j\rangle_{\vec{u}}$, où la projection de $\hat{J}$ sur la direction donnée par le vecteur unitaire $\vec{u}$ est *maximale*.
 - a) Montrer que $\langle \hat{J} \rangle$ pointe dans la direction $\vec{u}$ et donner sa norme.
 - b) Que vaut ΔJ^2 dans cet état ?
- 3 Définir et calculer, pour l'état $|j, j\rangle$, une *estimation* de la fluctuation $\Delta\beta$ de l'angle β entre $\hat{J}$ et sa valeur moyenne. *Indication* : Montrer que $\Delta J^2 = \langle \hat{J}^2 \sin^2 \beta \rangle$ et assimiler l'angle à son sinus. Comment se comporte cette fluctuation quand $j \rightarrow \infty$?

E.III États quasi-classiques de l'atome d'hydrogène

(J.C. Gay et coll., 1988)

On considère maintenant une situation où les deux générateurs de Pauli $\hat{J}_1$ et $\hat{J}_2$ sont quantifiés dans des directions arbitraires définies par les vecteurs unitaires $\vec{u}_1$ et $\vec{u}_2$. Comme on peut le voir sur la figure E.1 ci-dessous, $\vec{u}_1$ et $\vec{u}_2$ étant unitaires, $\vec{u}_1 + \vec{u}_2$ et $\vec{u}_1 - \vec{u}_2$ sont perpendiculaires, et permettent donc de définir les vecteurs de base $\vec{u}_z$ et $\vec{u}_x$ d'un repère orthonormé, le vecteur $\vec{u}_y$ étant choisi de manière à ce que $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$ forme un trièdre direct. On note α l'angle entre $\vec{u}_z$ et $\vec{u}_1$.

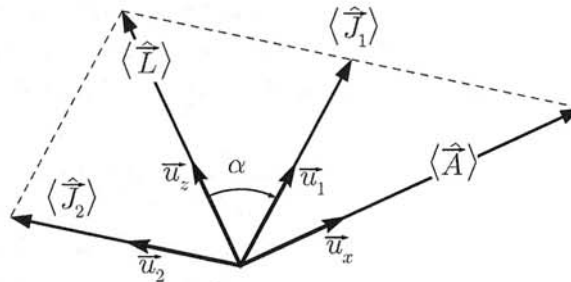


Fig. E.1 – Disposition relative, dans le plan défini par $\vec{u}_1$ et $\vec{u}_2$ des différents vecteurs considérés.

On s'intéresse aux états pour lesquels la projection de *chacun* de ces moments cinétiques sur l'axe de quantification correspondant est *maximale*. Ces états sont appelés « quasi-classiques » et sont définis par les valeurs de α et de j . On rappelle que l'on a $j_1 = j_2 = j$ à n fixé.

1 Valeurs moyennes et fluctuations de $\hat{L}$ et de $\hat{A}$

Calculer, en fonction de j , α et $\hbar$:

- la valeur moyenne du moment cinétique $\langle \hat{L} \rangle$, du vecteur de Laplace réduit $\langle \hat{A} \rangle$ et celle de l'excentricité e de la trajectoire (on prendra $e^2 = \langle \hat{A}^2 / \hat{L}^2 \rangle$).
- la fluctuation du moment cinétique ΔL^2 et celle du vecteur de Laplace réduit ΔA^2 ;
- la fluctuation de l'angle γ entre $\langle \hat{L} \rangle$ et $\vec{u}_z$, et celle de l'angle δ entre $\langle \hat{A} \rangle$ et $\vec{u}_x$.
- Conclure sur les fluctuations du plan contenant $\vec{r}$ et $\vec{p}$ quand $n \rightarrow \infty$. Pour quelles valeurs de l'angle α ce plan est-il bien défini ?
- Conclure sur les fluctuations du grand axe quand $n \rightarrow \infty$. Pour quelles valeurs de α cet axe est-il bien défini ? Commentaire ?

2 On étudie le cas limite $\alpha = 0$.

- Au vu de la valeur moyenne et des fluctuations de $\hat{L}$, que peut-on dire du plan de la trajectoire ?
- En considérant les propriétés de $\hat{A}$, justifier l'appellation « état circulaire » donnée à cet état.

3 On étudie l'autre cas limite $\alpha = \pi/2$.

- Au vu de la valeur moyenne et des fluctuations de $\hat{L}$, que peut-on dire du plan de la trajectoire ?
- En considérant les propriétés de $\hat{A}$, que peut-on dire du grand-axe de l'ellipse ? Justifier le nom d'« état cigare » donné à cet état.

4 Localisation

Pour caractériser de façon plus fine la localisation de l'électron, on introduit l'observable :

$$\hat{C} = mK \left(\hat{r} - \frac{\hat{r} \cdot \hat{A} + \hat{A} \cdot \hat{r}}{2} \hat{r} \right). \quad (\text{E.17})$$

- Que vaut $C_{cl.}$ en mécanique classique ? Que vaut $\langle \hat{C} \rangle$ en mécanique quantique ?
- Établir que :

$$\Delta C^2 = 4 \left(\langle \hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2 \rangle^2 - \langle \hat{J}_1 \rangle \cdot \langle \hat{J}_2 \rangle^2 \right). \quad (\text{E.18})$$

- On admet que, tout calcul fait, $\Delta C^2 = 4 (j^3 \sin^2(2\alpha) + j^2 \sin^4(\alpha)) \hbar^4$. Que peut-on en conclure ?

5 Atome en champs croisés

(W.E. Pauli, 1926)

On considère maintenant le cas où l'atome d'hydrogène est plongé dans un champ électrique extérieur $\vec{F} = F \vec{u}_x$ et un champ magnétique perpendiculaire $\vec{B} = B \vec{u}_z$. On admet que le hamiltonien quantique est exactement identique à celui obtenu à la question C.I.5.

- Exhiber deux états quasi-classiques *stationnaires* et d'énergie *extrémale*, c'est à dire tels que :
 - les valeurs moyennes $\langle \hat{L} \rangle$ et $\langle \hat{A} \rangle$ n'évoluent pas au cours du temps,
 - leur énergie est maximale ou minimale à l'intérieur de la couche caractérisée par n .

Relier, pour ces états, l'angle α et le rapport A/L au rapport Ω_F/Ω_B .

- Quels sont ces états en champ électrique seul ($B = 0 \neq F$) ?

- Même question en champ magnétique seul ($B \neq 0 = F$) ?

6 Excitation des états quasi-classiques

(M. Gross et coll., 1988)

Comme indiqué dans la partie D, la conservation du moment cinétique pour une transition à un photon impose que les nombres quantiques ℓ et m ne peuvent pas varier de plus d'une unité.

- Montrer que l'état circulaire ne peut pas être excité par une transition optique directement depuis l'état fondamental, mais que, par contre, l'état cigare peut l'être.
- On rappelle que les vecteurs classiques $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ suivent adiabatiquement les vecteurs $\vec{\Omega}_1$ et $\vec{\Omega}_2$ quand ces derniers varient lentement (cf. C.I.9). En déduire l'évolution adiabatique des états quasi-classiques.

- Proposer une méthode pour préparer l'état circulaire à partir d'un atome dans l'état fondamental en commençant par une transition optique vers les états de Rydberg.