

Examen

Exercice 1 : Corrections relativistes des premiers niveaux de l'atome d'hydrogène

On considère un atome d'hydrogène dans l'approximation d'un proton infiniment lourd et sans spin. L'hamiltonien faiblement relativiste de l'atome d'hydrogène s'exprime comme une somme d'un hamiltonien non relativiste H_0 et d'un hamiltonien de structure fine W_{sf} pouvant être traité comme une perturbation :

$$\begin{aligned} H &= H_0 + W_{sf} \\ &= H_0 + W_{mv} + W_{so} + W_D \\ &= H_0 - \frac{\mathbf{P}^4}{8m_e^3c^2} + \frac{e^2}{2m_e^2c^2R^3}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} + \frac{\pi e^2\hbar^2}{2m_e^2c^2}\delta(\mathbf{R}), \end{aligned} \quad (1)$$

avec \mathbf{P} et m_e l'impulsion et la masse de l'électron, \mathbf{R} la coordonnée relative électron-proton, $R = |\mathbf{R}|$ la distance relative électron-proton. \mathbf{S} et \mathbf{L} sont respectivement les moments cinétique de spin et orbital de l'électron. Les trois termes dans l'hamiltonien de structure fine sont de gauche à droite : la variation relativiste de la masse avec la vitesse, le couplage spin-orbite et le terme de Darwin.

1. Donner une expression de H_0 et l'énergie des niveaux $1s$, $2s$ et $2p$ non perturbés.
2. Pour le niveau $1s$ correspondant aux nombres quantiques $(n, l, m, m_s) = (1, 0, 0, m_s)$ (avec $m_s = \pm 1/2$) on veut évaluer les corrections du premier ordre au niveau fondamental de H_0 .
 - (a) Calculer $\langle 1, 0, 0 | \frac{1}{R^k} | 1, 0, 0 \rangle$ ($k = 1, 2$), puis, en utilisant la relation $\mathbf{P}^4 = (2m_e)^2(H_0 - V)^2$ (avec V le potentiel coulombien), montrer que $\langle 1, 0, 0, m_s | W_{mv} | 1, 0, 0, m'_s \rangle = -\frac{5}{8}m_e c^2 \alpha^4 \delta_{m_s, m'_s}$.
 - (b) Evaluer la correction provenant du terme de Darwin et l'exprimer en fonction de $m_e c^2 \alpha^4$.
3. Pour le premier niveau excité, l'hamiltonien de structure fine ne connecte pas les sous-couches $2s$ et $2p$, $[W_{sf}, \mathbf{L}^2] = 0$. On peut donc traiter séparément les corrections du premier ordre associées aux sous-espaces $2s$ et $2p$. De plus $[W_{mv}, \mathbf{L}] = 0$.
 - (a) montrer que $[W_{so}, \mathbf{L}^2] = 0$.
 - (b) Pour l'état $2s$, les calculs donnent $\langle 2, 0, 0, m_s | W_{sf} | 2, 0, 0, m'_s \rangle = -\frac{5}{128}m_e c^2 \alpha^4 \delta_{m_s, m'_s}$. Tout comme pour l'état $1s$ l'hamiltonien de couplage spin-orbite ne contribue pas à l'évaluation de ces éléments de matrice, pourquoi ?
 - (c) La matrice représentant W_{mv} à l'intérieur du sous-espace $2p$ est diagonale. Quelle information permet d'affirmer cela ? Un calcul donne $\langle W_{mv} \rangle_{2p} = -\frac{7}{384}m_e c^2 \alpha^4$.
 - (d) Les éléments de matrice $\langle W_D \rangle_{2p}$ sont nuls. Expliquer pourquoi.
 - (e) On donne $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = L_z S_z + L_+ S_- + L_- S_+$. Calculer $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} | 2, 1, m, m_s \rangle$ et conclure sur le fait que le couplage spin-orbite introduit des termes hors diagonaux dans la matrice représentant W_{so} à l'intérieur du sous-espace $2p$.
 - (f) L'utilisation de la base $|n, l = 1, J, M_J \rangle$ ($\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$) de vecteurs propres communs à H_0 , \mathbf{L}^2 , \mathbf{S}^2 , \mathbf{J}^2 et J_z donnent des valeurs propres de W_{so} indépendantes de M_J et valant : $\frac{1}{48}m_e c^2 \alpha^4 [\frac{1}{2}J(J+1) - \frac{11}{8}]$. Evaluer les différentes valeurs propres possibles de W_{so} .

4. Sur un schéma, placer les niveaux d'énergies $n = 1$ et $n = 2$ de H_0 ainsi que les niveaux de structure fine $1S_{1/2}$, $2S_{1/2}$, $2P_{1/2}$ et $2P_{3/2}$.

Formulaire :

$$\cdot \int_0^\infty x^k e^{-cx} dx = \frac{k!}{c^{k+1}}$$

$$\cdot \langle \mathbf{r}|1, 0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \langle \mathbf{r}|2, 1, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} Y_1^m(\theta, \phi)$$

. Constante de structure fine, rayon de Bohr et énergie de ionisation de l'atome d'hydrogène : $\alpha = e^2/\hbar c$, $a_0 = \hbar^2/m_e e^2$, $E_I = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}$.

Exercice 2 : Atome de carbone

On considère un atome de carbone ($Z = 6$), en regardant la masse du noyau comme infinie.

1. (a) Avec l'approximation du champ central, donner la configuration électronique de l'état fondamental en notation spectroscopique.
 (b) Expliquer la notation : quels sont les nombres quantiques des différents électrons ?
 (c) Quelle sous-couche n'est que partiellement remplie ?
2. On rappelle que les électrons des sous-couches complètement remplies ne contribuent pas au spin total et au moment cinétique orbital total. Avec le couplage L-S, les nombres quantiques de moment cinétique de l'état fondamental sont 3P_0 .
 (a) Expliquer cette notation.
 (b) Quel est le degré de dégénérescence de cet état ?
 (c) Pourquoi n'y a-t-il pas d'états 3D , contrairement au cas du couplage L-S pour deux électrons avec nombres quantiques principaux différents ?
 (d) Toujours en prenant en compte le couplage L-S, quels seront les nombres quantiques de moment cinétique du premier état excité ? Quel est son degré de dégénérescence ?

Exercice 3 : Molécule de deutérium

L'énergie de dissociation de la molécule d'hydrogène H_2 est 4.48 eV. L'énergie du premier mode vibratoire excité par rapport au niveau fondamental, $\Delta E = E_1 - E_0$, est $\Delta E = 0.52$ eV.

Trouver l'énergie de dissociation de la molécule de deutérium D_2 .

Pour rappel, le noyau de deutérium consiste en un proton et un neutron, qui ont approximativement les mêmes masses. On admettra que les valeurs des paramètres D et a du potentiel soient identiques pour D_2 et H_2 et on négligera les termes d'anharmonicité dans l'expression de l'énergie des premiers niveaux.