

## **TD 4-6 : Atome d'hydrogène**

## Exercice 6 : Particule dans un potentiel central

Soit une particule de masse  $\mu$  évoluant sous l'influence d'un potentiel central  $V(r)$ . On rappelle l'expression du laplacien en coordonnées sphériques :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (1)$$

L'opérateur différentiel en coordonnées sphériques représentant l'opérateur du moment cinétique orbital  $\mathbf{L}$  est donné dans l'exercice 4.

1. Ecrire le hamiltonien  $H$  du système en faisant apparaître l'opérateur  $\mathbf{L}^2$ . Montrer que  $[\mathbf{L}_z, \mathbf{L}^2] = 0$ , et que  $H$  commute avec  $\mathbf{L}^2$  et avec  $\mathbf{L}_z$ .

2. Dédurre de la question précédente que l'on peut chercher des solutions en séparant d'abord les variables angulaires et radiale, sous la forme :  $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ . Trouver les équations vérifiées par  $R(r)$  et  $Y(\theta, \phi)$  en s'appuyant sur le fait que les  $Y(\theta, \phi)$  sont les fonctions propres des opérateurs  $\mathbf{L}^2$  et  $\mathbf{L}_z$ . Discuter les valeurs que peuvent prendre les valeurs propres associées.

3. On appelle harmoniques sphériques les fonctions d'onde  $Y_l^m$  solutions propres de  $\mathbf{L}^2$  et  $\mathbf{L}_z$ .

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \begin{cases} (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta) & m \geq 0 \\ \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\phi} P_l^{-m}(\cos \theta) & m < 0, \end{cases} \quad (2)$$

où les fonctions de Legendre  $P_l^m$ , sont définies par :  $P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \left(\frac{d}{dx}\right)^m P_l(x)$ , avec  $P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx}\right)^l (x^2-1)^l$ . Calculer  $Y_0^0$  et  $Y_1^0$  et montrer qu'elles sont vecteurs propres de  $L^2$  et  $L_z$ , en calculant leurs valeurs propres associées.

4. On s'intéresse maintenant à la partie radiale de l'équation. Introduisez la fonction d'onde réduite  $u(r) = rR(r)$  et établissez l'équation satisfaite par  $u(r)$  sous la forme d'une équation de schrodinger à une dimension dans un potentiel effectif  $V_{eff}(r)$ .

## Exercice 7 : Atome d'hydrogène

L'atome d'hydrogène est un système à deux corps dont l'interaction est décrite par un potentiel central ne dépendant que de la distance entre les deux corps. On considère cet atome, comme formé d'un électron sans spin et

non-relativiste placé dans le champ coulombien d'un proton. L'hamiltonien du système est donc,

$$H = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{p}_p^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|}, \quad (3)$$

où  $\mathbf{p}_e, \mathbf{p}_p, \mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p$  désignent les opérateurs impulsion et position de l'électron et du proton.

1. Montrer que le mouvement relatif entre les deux particules est équivalent au problème d'une particule de masse dans un potentiel central  $V(r)$  traité dans l'exercice précédent. On exprimera en fonction de la masse du proton et de l'électron.

2. On va s'intéresser à l'équation radiale du mouvement relatif pour un proton infiniment lourd.

a) réécrire l'équation radiale en introduisant la variable  $\rho$  et la constante  $\rho_0$  sans dimensions satisfaisant :  $\rho = \frac{\sqrt{2m_e|E|}}{\hbar}r$  et  $\rho_0 = \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa}$ .

b) Evaluer le comportement asymptotique des solutions radiales pour  $\rho \rightarrow 0$  et  $\rho \rightarrow +\infty$ .

c) Simplifier le comportement asymptotique en posant  $u(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho)$  et obtenir l'équation vérifiée par  $v(\rho)$ .

d) Supposer que  $v(\rho)$  peut s'exprimer comme une série de puissance en  $\rho$  :  $v(\rho) = \sum_s^\infty c_s \rho^s$ . En égalant les termes de puissance égale de  $\rho$ , montrer que :  $c_{s+1} = \frac{2(s+l+1)-\rho_0}{(s+1)(s+2l+2)}c_s$ .

e) La série doit avoir un nombre limité de termes. Le justifier et en déduire les énergies autorisées sous la forme de la formule de Bohr.

3. Ecrire la forme complète de la fonction d'onde du niveau fondamental  $\Psi_{100}(r, \theta, \phi)$ .

4. En étudiant uniquement le mouvement relatif du proton et de l'électron quel terme de l'hamiltonien a été négligé dans le traitement précédent? Y-a-t-il un intérêt à le prendre en compte dans le système isolé proton+électron?

## Exercice 8 : Effet d'un champ statique uniforme

On considère un atome d'hydrogène (le degré de liberté de spin étant négligé) plongé dans un champ statique uniforme suffisamment faible pour que le terme d'interaction puisse être traité en perturbation. On calculera les décalages des niveaux d'énergie au premier ordre en champ. Le champ sera magnétique ou électrique et parallèle à Oz.

On donne les fonctions d'ondes des niveaux  $n = 1$  et  $n = 2$  de l'atome d'hydrogène :

$$\begin{aligned}\Psi_{1,0,0} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}, \\ \Psi_{2,0,0} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-3/2} e^{-r/(2a_0)} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right), \\ \Psi_{2,1,0} &= \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} a_0^{-5/2} r e^{-r/(2a_0)} \cos \theta, \\ \Psi_{2,1,\pm 1} &= \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} a_0^{-5/2} r e^{-r/(2a_0)} \sin \theta e^{\pm i\phi}.\end{aligned}$$

1. Effet Zeeman normal : On considère dans ce cas un champ magnétique  $\mathbf{B}$ . L'électron voit son énergie cinétique modifiée et valant  $(\mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2/2m_e$  avec  $\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{r} \wedge \mathbf{B}$ . Ecrire l'hamiltonien d'interaction et déterminer les décalages d'énergie pour tous les niveaux  $n$ .

2. Effet Stark : On considère dans ce cas un champ électrique  $\mathcal{E}$ . L'hamiltonien Stark  $W_S$  qui décrit l'énergie d'interaction du moment dipolaire électrique  $q\mathbf{R}$  de l'atome avec le champ électrique, s'écrit :

$$W_S = -q\mathcal{E}Z. \quad (4)$$

Faire l'étude sur les niveaux  $n = 1$  et  $n = 2$  et déterminer également les nouveaux états propres.

## Exercice 9 : Correction relativiste et structure fine de l'atome d'hydrogène

Lorsque l'électron est traité comme particule relativiste avec un degré de liberté interne il apparaît, entre autre, une interaction entre son moment cinétique de spin et son moment cinétique orbital. C'est ce que l'on appelle le couplage spin orbite. Ce couplage provient de l'interaction entre le moment magnétique intrinsèque  $\mathbf{M}_S = q\mathbf{S}/m_e$  et un champ magnétique  $\mathbf{B}$  apparaissant dans le référentiel propre de l'électron en mouvement à la vitesse  $\mathbf{v}$  dans le champ électrostatique du proton  $\mathbf{E}$ . Ce champ  $\mathbf{B}$  est prédit par la relativité restreinte et s'exprime comme  $\mathbf{B} = -\frac{1}{c^2}\mathbf{v} \wedge \mathbf{E}$ .

1. Montrer que le terme d'interaction spin-orbite  $W_{so}$  peut se mettre sous la forme :

$$W_{so} = \frac{e^2}{m_e^2 c^2} \frac{1}{R^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (5)$$

2. On note  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  le moment cinétique total de l'électron. Après avoir exprimé  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  en fonction de  $\mathbf{J}^2$ ,  $\mathbf{L}^2$ ,  $\mathbf{S}^2$  et identifier quels opérateurs commutent avec le hamiltonien total, définir les états propres qu'il convient d'utiliser pour la théorie des perturbations, puis, calculer la correction des énergies au premier ordre en fonction de  $\langle \frac{1}{R^3} \rangle$ .

3. On donne l'expression de la partie radiale de la fonction d'onde normalisée :

$$R_{nl}(r) = \left( \frac{2}{na_0} \right)^{3/2} \left( \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right)^{1/2} e^{-\frac{2r}{na_0}} (2r/na_0)^l L_{n-l-1}^{(2l+1)}(2r/na_0), \quad (6)$$

où  $L_0^{(\alpha)}(x) = 1$  et  $L_1^{(\alpha)}(x) = 1 + \alpha - x$ .

Déterminer la correction à l'énergie pour le niveau  $n = 2$ .

4. Quelle est l'incidence de l'existence du spin de l'électron sur les résultats de l'exercice 8? On supposera que l'effet du champ est faible par rapport aux autres termes d'interaction et on recalculera les décalages en énergie.