

Examen

Exercice 1 : Atome d'hélium

On considère un atome neutre d'hélium dans un état stationnaire qui est aussi état propre des opérateurs $\vec{S}^2$ et S_z (où $\vec{S}$ est le spin total). Dans l'approximation du champ central, les nombres quantiques n et l des deux électrons sont $(n = 1, l = 0)$ et $(n = 3, l = 2)$.

1. Combien y a-t-il d'états différents de ce type ? Ils sont caractérisés par quel(s) nombre(s) quantique(s) ?
2. Supposons que les fonctions d'onde spatiales ψ_{1s} et ψ_{3d} soient connues. Donner l'expression des états quantiques en fonction de $\psi_{1s}(\vec{x}_i)$, $\psi_{3d}(\vec{x}_i)$ et des vecteurs de spin $|\pm\rangle_i$ (où $i = 1, 2$ désigne les deux électrons).
3. En négligeant le couplage spin-orbite, donner le degré de dégénérescence de ces états. Parmi eux, lequel a l'énergie la plus basse ? Pourquoi son énergie est-elle réduite par rapport aux autres ? Écrire son état quantique sous forme de déterminant de Slater.
4. Maintenant on prend en compte le couplage spin-orbite. Esquisser un schéma des niveaux d'énergie en indiquant le(s) nombre(s) quantique(s) pertinent(s) pour chaque niveau.

L'atome d'hélium est maintenant dans l'état 2^3S . L'effet éventuel du couplage spin-orbite est à prendre en compte pour la suite.

5. Expliquer la notation " 2^3S ". L'état est-il dégénéré ?
6. Donner son énergie, sous l'hypothèse que la répulsion coulombienne entre les électrons soit négligeable.
7. On souhaite utiliser la méthode variationnelle de Rayleigh-Ritz pour une meilleure estimation de son énergie. Décrire (brièvement mais précisément) une stratégie possible pour trouver une approximation de l'énergie de l'état 2^3S avec la méthode variationnelle. En particulier, proposer une forme de fonction d'onde spatiale convenable et justifier ce choix. Il n'est pas demandé d'effectuer le calcul en détail.
8. On souhaite calculer l'énergie de l'état 2^3S au premier ordre en théorie des perturbations. Donner l'expression du décalage d'énergie par rapport à l'expression de question 6. sous forme d'intégrale multiple en coordonnées sphériques. Il n'est pas demandé d'évaluer cette intégrale.

Exercice 2 : Atome d'hydrogène

On considère un atome d'hydrogène sans correction de structure fine et sans spin. On appelle série de Balmer, la série de raies spectrales de l'atome d'hydrogène correspondant à une transition électronique d'un état quantique de nombre principal $n > 2$ vers $n = 2$.

1. Déterminer la longueur d'onde de la transition la plus énergétique de la série de Balmer.

On s'intéresse dans la suite à la transition la moins énergétique de la série de Balmer ($n = 3 \rightarrow n = 2$).

Pour une transition dipolaire électrique, la probabilité de transition d'un état $|i\rangle$ vers un état $|n\rangle$ est proportionnelle à $|\mathbf{e} \cdot \langle n | \mathbf{P} | i \rangle|^2$, avec $\mathbf{e}$ le vecteur polarisation de la radiation émise ou absorbée. Les états $|i\rangle$ et $|n\rangle$ étant états propres de H_0 hamiltonien d'un électron de masse m_e dans un potentiel central.

2. On rappelle que $[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$ et que $[X_i, F(P_i)] = i\hbar F'(P_i)$. Calculer $\langle n|[X_i, H_0]|i\rangle$ et en déduire que la probabilité de transition est également proportionnelle à $|\mathbf{e} \cdot \langle n|\mathbf{X}|i\rangle|^2$.
3. En utilisant les propriétés des harmoniques sphériques, montrer qu'une transition $|n=2, l=1, m\rangle \rightarrow |n'=3, l'=1, m'\rangle$ n'est pas permise.
4. Les règles de sélection pour une transition dipolaire électrique sont $\Delta l = l' - l = \pm 1$ et $\Delta m = m' - m = 0, \pm 1$. Combien y-a-t-il de transitions permises entre $n=3$ et $n=2$?

L'atome d'hydrogène est plongé dans un champ magnétique uniforme et constant $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_3$. L'hamiltonien prend alors la forme $H = H_0 + W_z$ avec $W_z = -\frac{e}{m_e c} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}$, $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \wedge \mathbf{X}$ et e la charge de l'électron.

5. Montrer que $W_z = -\frac{e}{2m_e c} BL_3$, avec $\mathbf{L} = \mathbf{X} \wedge \mathbf{P}$ le moment cinétique orbital.
6. Les états propres de H_0 sont-ils états propres de l'hamiltonien d'interaction Zeeman W_z ?
7. Calculer $H|n, l, m\rangle$ et représenter sur un diagramme en énergie les niveaux $|n=2, l=1, m\rangle$ et $|n'=3, l'=2, m'\rangle$ avec et sans champ magnétique appliqué.
8. Combien y-at-il de transitions dipolaires électriques d'énergies différentes?

Formulaire :

$hc = 1240 \text{ eV.nm}$; énergie de ionisation de l'atome d'hydrogène 13.6 eV.

Coordonnées sphériques : $x = r \sin \theta \cos \phi$, $y = r \sin \theta \sin \phi$, $z = r \cos \theta$.

Harmoniques sphériques : $Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$; $Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$; $Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$.

Fonctions d'onde des états stationnaires d'un atome hydrogéné de charge nucléaire Z :

$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr}$, $\psi_{200}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{Z^5}{(2Z^2 - 6Z + 6)\pi}} (2 - r) e^{-Zr/2}$; énergies : $E_n = -Z^2/(2n^2)$.