

Mécanique quantique II

Examen partiel – Lundi 07 mars 2022

Durée : 2 heures

Le sujet est composé de deux exercices indépendants qui peuvent donc être traités dans l'ordre que vous souhaitez. Il est demandé d'indiquer le numéro qui identifie chaque question, avant de présenter la solution proposée.

Exercice A : effet de volume du noyau sur les niveaux atomiques

Les niveaux d'énergie et les états stationnaires de l'atome d'hydrogène ont été calculés en considérant le proton comme une charge ponctuelle qui crée un potentiel électrostatique coulombien en $1/r$:

$$V^{(0)}(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}. \quad (1)$$

où q est la charge élémentaire de l'électron ou du proton. Ce n'est pas tout à fait le cas : la charge du proton n'est pas strictement ponctuelle mais est répartie dans un volume dont la dimension caractéristique est de l'ordre du fermi ($1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$).

(A.1) Indiquer quelles orbitales parmi s , p , d , $\dots$ de l'atome d'hydrogène correspondent à une probabilité de présence non nulle de l'électron au niveau du proton, c'est-à-dire en $r = 0$.

Pour ces orbitales, l'électron est soumis à un potentiel dont la dépendance spatiale n'est plus en $1/r$ et dépend de la distribution spatiale de charge associée au proton. Les niveaux d'énergie de l'atome, qui sont déterminés par le potentiel auquel est soumis l'électron, vont être modifiés par cette répartition de charge. L'étude expérimentale et théorique de cet "effet de volume" peut ainsi nous renseigner sur la structure interne des noyaux atomiques. L'objet de l'exercice est de considérer un modèle simplifié de cet effet pour obtenir des ordres de grandeur de cet effet pour l'atome d'hydrogène et pour des atomes muoniques. Pour cela nous considérons un modèle où la charge positive du noyau est représentée comme une très fine coquille sphérique de rayon b .

Pour donner un traitement très simplifié de cet effet, on considère que la charge du proton est répartie de façon uniforme comme une coquille sphérique infiniment mince, de rayon $b \approx 1 \text{ fm}$. Le potentiel électrostatique s'écrit alors :

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad \text{pour } r > b, \quad V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{b} \quad \text{pour } r \leq b. \quad (2)$$

On considère $W = V - V^{(0)}$ comme une perturbation par rapport au Hamiltonien utilisé pour calculer les états stationnaires de l'atome d'hydrogène, ce qui revient à prendre en compte l'opérateur

$$\hat{W} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\hat{r}} - \frac{1}{b} \right) \quad (3)$$

et à lui appliquer la théorie des perturbations. Dans l'équation (3) $\hat{r}$ est l'opérateur défini par $\hat{r} = \|\hat{\mathbf{r}}\|$. On rappelle que l'opérateur $\hat{r}$ agissant sur une fonction d'onde $\psi(r, \theta, \varphi)$ en coordonnées sphériques revient à effectuer le produit $r\psi(r, \theta, \varphi)$. De même, l'opérateur indiqué comme $1/\hat{r}$ dans l'équation (3) agit comme $\psi(r, \theta, \varphi)/r$.

(A.2) On considère l'état $\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\Omega)$ où $R_{n,l}(r)$ désigne la fonction d'onde radiale pour les nombres quantiques (n, l) et où $Y_{l,m}(\Omega)$ est l'harmonique sphérique pour les variables angulaires $\Omega = (\theta, \varphi)$ associée aux nombres quantiques (l, m) . En exprimant l'élément de matrice $\langle \psi_{n,l,m} | \hat{W} | \psi_{n',l',m'} \rangle$ justifier que dans le sous-espace $\mathcal{E}_n$ correspondant au niveau n du Hamiltonien non-perturbé, la perturbation $\hat{W}$ est diagonale.

En déduire la correction d'énergie au premier ordre qu'on exprimera comme une intégrale sur la variable r fonction de $R_{n,l}(r)$ et de $W(r)$.

(A.3) On considère l'effet de la perturbation sur l'état $1s$ pour lequel $R_{1,0}(r) = 2a^{-3/2} \exp(-r/a)$ où $a = 0.53 \times 10^{-10} \text{ m}$ est le rayon de Bohr. Montrer que $\Delta E_{1,0}$ est donnée par

$$\Delta E_{1,0} = \frac{4}{a^3} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^b dr \left(r - \frac{r^2}{b} \right) \exp(-2r/a). \quad (4)$$

On pourra admettre ce résultat intermédiaire pour la suite.

(A.4) Justifier que dans cette intégrale, on puisse prendre $\exp(-2r/a) \approx 1$, et en déduire $\Delta E_{1,0}$. Interpréter le signe de la correction en énergie.

(A.5) L'énergie du niveau fondamental de l'atome fondamental est $E_{1,0} = -E_I$ avec $E_I = q^2/(4\pi\epsilon_0 a)$. En déduire l'ordre de grandeur de la correction d'énergie relative $|\Delta E_{1,0}/E_{1,0}|$. Le traitement perturbatif est-il légitime ?

(A.6) Les physiciens nucléaires sont parvenus à fabriquer artificiellement des atomes muoniques dans lesquels un muon μ^- de charge négative $-q$ et $(Z - 1)$ électrons de charge $-q$ sont liés à un noyau de charge totale Zq , où q est la charge élémentaire. Le muon μ^- se comporte donc comme un électron mais avec une masse m_μ qui est approximativement 207 fois celle m_e de l'électron.

(a) Justifier que pour cet atome muonique, le rayon de Bohr a de l'atome d'hydrogène doit être remplacé par

$$a_\mu = a \frac{1}{Z} \frac{m_e}{m_\mu} \quad (5)$$

et calculer a_μ/a dans le cas d'un atome muonique de Pb pour avec $Z = 82$.

(b) À partir de l'ordre de grandeur précédent, que peut-on dire de l'effet des autres électrons de l'atome sur le muon par rapport à l'effet des interactions entre le noyau et le muon ? En déduire que le système noyau-muon se comporte comme un ion hydrogénoïde qui lie le muon μ^- de charge $-q$ au noyau de charge $+Zq$. Donner l'ordre de grandeur de l'énergie $|E_{1,0}|_{(\text{Pb}, \mu^-)}$ du niveau fondamental pour un tel système.

- (c) Pour déterminer l'effet de volume du noyau, il faut évaluer b sachant que le rayon d'un noyau évolue grossièrement comme $A^{1/3}$. Le noyau de Pb a $A = 208$ de sorte que b est ainsi approximativement 6 fois plus grand pour le plomb que pour l'hydrogène. En déduire l'ordre de grandeur de $|\Delta E_{1,0}/E_{1,0}|_{(\text{Pb}, \mu^-)}$ dans le cas de l'atome muonique de Pb. Le traitement perturbatif est-il justifié dans ce cas ?

Exercice B : effet d'un champ magnétique sur un atome à un électron de moment angulaire orbital $l = 1$

On applique un champ magnétique statique sur un atome à un électron avec un moment angulaire orbital $l = 1$ et un spin $s = 1/2$. Le champ magnétique est orienté selon l'axe z , soit $\mathbf{B} = B\mathbf{z}$, en supposant $B \geq 0$ et où $\mathbf{z}$ désigne le vecteur unitaire le long de cet axe. On restreint le Hamiltonien de l'atome aux termes liés aux deux moments angulaires, soit :

$$\hat{H} = \frac{\mu_B B}{\hbar} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) + \frac{2g}{\hbar^2} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (6)$$

où $\hat{\mathbf{L}}$ et $\hat{\mathbf{S}}$ sont les opérateurs pour le moment angulaire orbital et le spin, et $\hat{L}_z$ et $\hat{S}_z$ leurs composantes suivant l'axe z . Dans l'équation (6), μ_B est le magnéton de Bohr et g le couplage entre les deux moments angulaires qui est induit par l'interaction spin-orbite. On note $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_0\rangle$ et $|\varphi_{-1}\rangle$ les états propres de $\hat{L}_z$ associés aux valeurs propres respectives $+\hbar$, 0 et $-\hbar$. De même, $|+\rangle$ et $|-\rangle$ désignent les états propres de $\hat{S}_z$ pour les valeurs propres $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$.

(B.1) Montrer que

$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ \hat{S}_- + \hat{L}_- \hat{S}_+) + \hat{L}_z \hat{S}_z \quad (7)$$

où $\hat{L}_+$ et $\hat{L}_-$ sont les opérateurs échelles associés au moment angulaire orbital, et $\hat{S}_+$ et $\hat{S}_-$ ceux associés au spin.

- (B.2) On considère l'espace $\mathcal{E}$ produit tensoriel des espaces associés aux deux degrés de liberté, orbital et spin, et qui est donc de dimension $3 \times 2 = 6$. Exprimer les vecteurs de la base "produit" de $\mathcal{E}$ qui est composée des vecteurs propres communs aux opérateurs $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{\mathbf{S}}^2$, $\hat{L}_z$ et $\hat{S}_z$.
- (B.3) On note $\epsilon = \mu_B B$. Calculer l'action de $\hat{H}$ sur ces six vecteurs de la base produit.
- (B.4) Les kets de la base produit sont notés $\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \dots, |\chi_6\rangle\}$. La matrice qui représente le Hamiltonien $\hat{H}$ en fonction de ces kets s'écrit comme

$$H = \begin{pmatrix} g + 2\epsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -g & g\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g\sqrt{2} & \epsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\epsilon & g\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g\sqrt{2} & -g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g - 2\epsilon \end{pmatrix} \quad (8)$$

Identifier chacun des kets $|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \dots, |\chi_6\rangle$ aux vecteurs de base proposés en réponse à la question (B.2).

La matrice H est une matrice “blocs” qui se factorise en deux matrices 1×1 dans les coins haut-gauche et bas-droit et deux matrices 2×2 qui sont situées au centre. Les deux matrices 1×1 ont pour valeurs propres évidentes

$$\lambda_1 = g + 2\epsilon, \quad \lambda_6 = g - 2\epsilon \quad (9)$$

qui correspondent aux états propres respectifs $|\chi_1\rangle$ et $|\chi_6\rangle$. Considérons ensuite la matrice 2×2 du coin supérieur gauche qui est formée par les éléments H_{22} , H_{23} , H_{32} et H_{33} , c’est-à-dire :

$$\begin{pmatrix} -g & g\sqrt{2} \\ g\sqrt{2} & \epsilon \end{pmatrix}.$$

Les valeurs propres de cette matrice sont

$$\lambda_2 = \frac{1}{2} \left[-g + \epsilon + \sqrt{(g + \epsilon)^2 + 8g^2} \right], \quad \lambda_3 = \frac{1}{2} \left[-g + \epsilon - \sqrt{(g + \epsilon)^2 + 8g^2} \right]. \quad (10)$$

De même, la matrice 2×2 du coin inférieur droit qui est formée par les éléments H_{44} , H_{45} , H_{54} et H_{55} , c’est-à-dire :

$$\begin{pmatrix} -\epsilon & g\sqrt{2} \\ g\sqrt{2} & -g \end{pmatrix}$$

a comme valeurs propres

$$\lambda_4 = \frac{1}{2} \left[-(g + \epsilon) + \sqrt{(g - \epsilon)^2 + 8g^2} \right], \quad \lambda_5 = \frac{1}{2} \left[-(g + \epsilon) - \sqrt{(g - \epsilon)^2 + 8g^2} \right]. \quad (11)$$

La figure 1 ci-dessous représente la variation de ces six énergies en fonction du paramètre ϵ/g qui est proportionnel au champ magnétique B appliqué à l’atome.

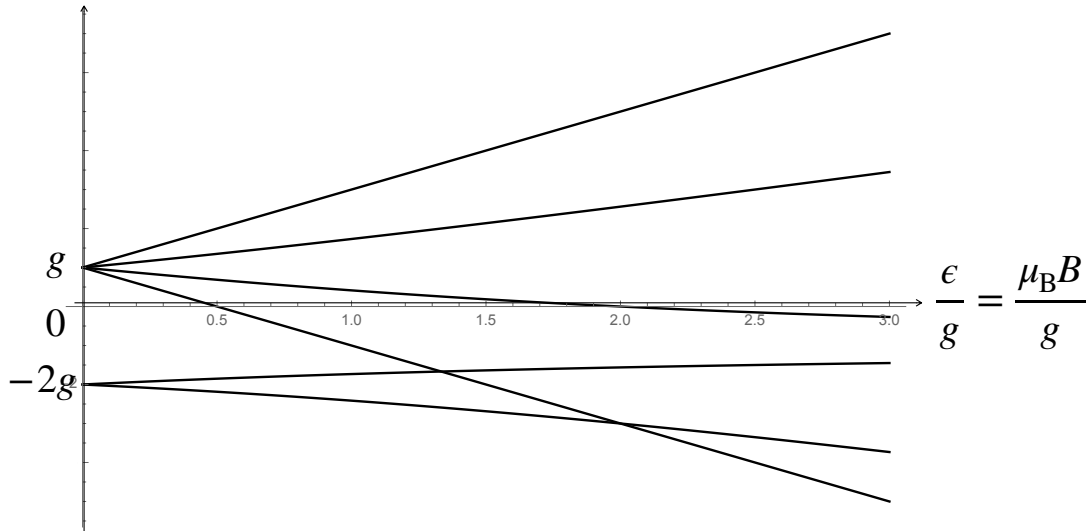


FIGURE 1 – Niveaux d’énergie pour un électron de moment angulaire $l = 1$ en fonction du champ magnétique B et du couplage spin-orbite g .

(B.5) On considère le cas des champs “faibles” correspondant à $\mu_B B \ll g$, soit $\epsilon \ll g$.

- (a) À partir des expressions (9), (10) et (11), exprimer les énergies en fonction de g et ϵ . On donnera les expressions au premier ordre en ϵ .

Dans ce régime, le Hamiltonien donné par l'équation (6) peut être décomposé en

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (12)$$

avec

$$\hat{H}_0 = \frac{2g}{\hbar^2} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad \text{et} \quad \hat{V} = \frac{\mu_B B}{\hbar} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \quad (13)$$

en considérant l'effet de l'interaction $\hat{V}$ entre l'atome et le champ magnétique comme une perturbation par rapport au terme $\hat{H}_0$ correspondant au couplage spin-orbite. Pour cela, on considère le moment angulaire total j obtenu par addition du moment angulaire orbital $l = 1$ et du spin $s = 1/2$, et qui peut prendre les valeurs propres $j = \frac{1}{2}$ ou $j = \frac{3}{2}$. On admet que les états $|j, m_j\rangle$ de la base “couplée” s'expriment en fonction des états $\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \dots, |\chi_6\rangle\}$ de la base produit selon les expressions :

m_j	$j = \frac{3}{2}$	$j = \frac{1}{2}$
$\frac{3}{2}$	$ \chi_1\rangle$	
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \chi_2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \chi_3\rangle$	$\sqrt{\frac{2}{3}} \chi_2\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} \chi_3\rangle$
$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{2}{3}} \chi_4\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \chi_5\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}} \chi_4\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \chi_5\rangle$
$-\frac{3}{2}$	$ \chi_6\rangle$	

- (c) Écrire la matrice de $\hat{H}_0$ dans la base couplée des états propres $|j, m\rangle$ associée aux observables $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$, $\hat{J}^2$ et $\hat{J}_z$. En déduire les énergies en champ nul $B = 0$ et indiquer les états propres associés.
- (d) Les expressions des états couplés données ci-dessus permettant de calculer la matrice de $\hat{V}$ dans la base couplée, comme nous l'avons fait précédemment dans la base produit. Dans la base $\{|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle\}$, cette matrice s'écrit :

$$V = \epsilon \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 & \frac{2}{3} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 & -\frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

En utilisant la théorie des perturbations au premier ordre, en déduire l'effet du champ magnétique sur les niveaux d'énergie de l'atome. montrer qu'il lève les dégénérescences des niveaux qui existent en champ nul. C'est l'effet Zeeman.

- (e) Interpréter ce résultat sur la figure 1 qui représente les énergies du système. Indiquer quels sont les états qui correspondent aux différentes branches du schéma.
- (B.6) On se place maintenant dans le cas des champs “forts” correspondant à $\mu_B B \gg g$, soit $\epsilon \gg g$. Ce régime porte le nom d’effet Paschen-Back.
- (a) En utilisant à nouveau les équations (9), (10) et (11), donner les expressions limites des énergies en fonction de g et ϵ , en se limitant au premier ordre en g .
- (b) Proposer les états quantiques qui sont respectivement associés à ces valeurs limites.

———— FIN DE L’ÉPREUVE ————