

Travaux Dirigés n°4

Structure fine de l'atome d'Hydrogène

Pour des énergies faibles, l'Hamiltonien d'un électron soumis à un champ électrique dérivé d'un potentiel central $\phi(r)$ peut s'écrire

$$H = H_0 + H_1$$

où

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_e} + V(r)$$

avec $V(r) = q_e \phi(r)$ ($V(r) = -e^2/r$, pour l'atome d'hydrogène), est l'Hamiltonien d'ordre zéro non relativiste.

L'opérateur H_1 est un terme correctif appelé Hamiltonien de structure fine, qui tient compte des effets relativistes. On l'écrit sous la forme :

$$H_1 = W_m + W_D + W_{so}$$

où

$$W_m = -\frac{p^4}{8m_e^3 c^2}$$

est la correction de masse relativiste,

$$W_D = \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \nabla^2 V(r)$$

est appelé *terme de Darwin* et

$$W_{so} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$$

est le terme *spin-orbite* avec \mathbf{l} le moment cinétique orbital de l'électron et \mathbf{s} son spin. Cette expression de H_1 résulte d'un développement limité de l'équation relativiste de Dirac à l'ordre 2 en v^2/c^2 .

- Calculer, au premier ordre d'un calcul de perturbations, les corrections à l'énergie des niveaux de l'atome d'hydrogène associées aux trois termes de H_1 .
- Montrer que les trois termes correctifs sont du même ordre de grandeur et que leur somme conduit à une correction de l'énergie ne dépendant pas du nombre quantique ℓ .
- La résolution exacte de l'équation de Dirac donne pour les niveaux d'un atome d'hydrogène les énergies (mesurées par rapport à $m_e c^2$) :

$$E_{n,j} = m_e c^2 \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n - j - 1/2 + \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2} \right)^2} \right]^{-1/2} - m_e c^2$$

où j est le nombre quantique associé au moment cinétique $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ et $\alpha = e^2/\hbar c$ est la *constante de structure fine*. Montrer par un développement en puissances de $\epsilon = (Z\alpha)^2$ limité à l'ordre 2, que l'on retrouve l'expression calculée avec H_1 .

- d. La raie H_α correspond à la transition $n = 3 \rightarrow n = 2$ de l'hydrogène. Quelle est la décomposition de cette raie si l'on tient compte de l'Hamiltonien de structure fine?

On pourra s'aider des résultats suivants (qu'il est recommandé de vérifier au moins pour les cas $n = 1$ et 2):

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n,l,m} | \frac{1}{r} | \psi_{n,l,m} \rangle &= \frac{Z}{a_0 n^2} \\ \langle \psi_{n,l,m} | \frac{1}{r^2} | \psi_{n,l,m} \rangle &= \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l+1/2)} \\ \langle \psi_{n,l,m} | \frac{1}{r^3} | \psi_{n,l,m} \rangle &= \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)} \quad (\text{pour } l \geq 1) \\ |\psi_{n,l,m}(0)|^2 &= \frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3} \delta_{l,0} \delta_{m,0} \end{aligned}$$

$$\Delta V(r) = -e^2 \Delta \left(\frac{1}{r} \right) = 4\pi e^2 \delta(\vec{r})$$

Travaux Dirigés n°5

Structure hyperfine et effet Zeeman de l'atome d'Hydrogène

Soit H_0 l'Hamiltonien atomique ne tenant pas compte de l'interaction dipolaire magnétique entre le moment cinétique de spin du noyau I et le moment cinétique électronique total $J = L + S$ des électrons. Cette interaction donne lieu à la structure hyperfine des raies spectrales. Pour un état propre de H_0 avec nombres quantiques ℓ et j donnés, l'Hamiltonien associé à ce couplage, peut s'écrire :

$$H_{hf} = A' \frac{1}{\hbar^2} (\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})$$

où

$$A' = \frac{\mu_0}{4\pi} 2 g_I \mu_B \mu_N \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 (\ell + 1/2) j(j + 1/2)}$$

avec g_I : facteur de Landé (sans dimension), $\mu_B = q_e \hbar / 2 m_e = -9,27 \cdot 10^{-24}$ J/T : magnéton de Bohr (électronique) et $\mu_N = |q_e| \hbar / 2 M_p$: magnéton de Bohr nucléaire. Pour le proton, $I = 1/2$.

1 Structure hyperfine du niveau 1s de l'hydrogène

On appelle $F = J + I$ l'opérateur associé au moment cinétique total. Pour l'état 1s on a $J = S$.

- Rappeler l'expression des états dans la base du spin total (S^2, I^2, F^2, F_z) en termes de ceux de la base (S^2, I^2, S_z, I_z).
- Exprimer H_{hf} en fonction de S^2, I^2, F^2 . Calculer ses valeurs propres.
- Application numérique : $g_I = 5,59$.

2 Effet Zeeman sur la structure hyperfine du niveau 1s de l'hydrogène

- Montrer que l'Hamiltonien Zeeman de couplage entre un champ magnétique extérieur B_0 dirigé selon l'axe 0z et les différents moments magnétiques électroniques et nucléaires, peut s'écrire :

$$H_Z = \omega_e (L_z + 2 S_z) + \omega_N I_z$$

où

$$\omega_e = -\frac{\mu_B}{\hbar} B_0; \quad \omega_N = -\frac{\mu_N g_I}{\hbar} B_0$$

- Calculer les valeurs propres de H_Z .

- c. D duire la matrice repr sentative de l'Hamiltonien $H_1 = H_{hf} + H_Z$ dans la base du moment cin tique total.
- d. Calculer les valeurs propres de H_1 . Tracer leur variation en fonction de B_0 .
- e. Calculer les  tats propres de H_1 . Quels sont les  tats propres pour les limites $B_0 \rightarrow 0$ et $B_0 \rightarrow \infty$?

3 Effet Zeeman sur la structure hyperfine r sultante du couplage entre un spin nucl aire $I = 5/2$ et un spin  lectronique $S = 1/2$

- a. Calculer les valeurs propres associ es   H_{hf} en l'absence de champ ext rieur B_0 .
- b. Dans le cas $B_0 \neq 0$ tel que $H_{sf} \gg H_Z \gg H_{hf}$ utiliser le calcul de perturbations au premier ordre pour  valuer successivement l'action de H_Z puis de H_{hf} . Montrer que la correction  nerg tique totale peut s' crire :

$$\Delta E = g \mu_B B_0 m_s + A' m_s m_I$$

Travaux Dirigés n°6

Effet Stark de la raie Lyman α de l'atome d'hydrogène

1 Structure fine en champ nul

La raie Lyman α correspond à la transition $n = 2 \rightarrow n = 1$

- En supposant négligeable la structure fine, calculer l'énergie des photons émis lors de cette transition en l'absence de champ extérieur.
- Donner la structure fine du niveau $n = 2$, en déduire la structure fine de la raie Lyman α (on représentera les niveaux sur un diagramme d'énergie).

2 Effet Stark sur le niveau fondamental

- Indiquer la nature de l'interaction Stark. Donner le hamiltonien correspondant.
- Montrer qu'il n'y a pas d'effet Stark linéaire sur l'état $1s$.
- Montrer qualitativement que l'effet Stark quadratique produit un abaissement du niveau fondamental : $\Delta E_{1s}^{(2)}$
- Au second ordre de la théorie des perturbations, il est possible d'obtenir une limite supérieure du déplacement Stark $\Delta E_{1s}^{(2)}$ du fondamental en remplaçant $(E_{1s} - E_n)$ par $(E_{1s} - E_2)$. Calculer ce déplacement en utilisant la relation

$$\sum_{n,l,m} |\langle nlm | A | 100 \rangle|^2 = \langle 100 | A^2 | 100 \rangle$$

que l'on démontrera.

3 Effet Stark en champ fort sur le niveau $n = 2$

- Indiquer la condition à remplir pour se trouver en champ fort.
- Montrer que l'on peut alors avoir un effet Stark linéaire sur les niveaux excités de l'hydrogène.
- Ecrire la matrice du hamiltonien Stark pour le sous-espace associé au niveau $n = 2$.
- Calculer le déplacement Stark des différents états. Tracer la décomposition du niveau $n = 2$ sur un diagramme d'énergie.
- En utilisant ces résultats et ceux de la partie précédente, représenter sur un diagramme d'énergie les composantes Stark de la raie Lyman α en précisant leur polarisation.

4 Effet Stark en champ faible sur le niveau $n = 2$

- a. Montrer que seuls les états de $j = 1/2$ peuvent subir un effet Stark **linéaire**. Donner la liste de ces états (dans la base couplée).
- b. Ecrire la matrice du hamiltonien Stark pour le sous-espace correspondant à $j = 1/2$. Montrer qu'elle est diagonalisable par blocs (correspondant aux deux valeurs de m_j) que l'on diagonalisera. on rappelle que Z commute avec J_z
- c. Effectuer le calcul des éléments de matrice de H_S en exprimant les états de la base couplée à l'aide des états de la base découplée $|l, s, m_l, m_s\rangle$ (coefficients de Clebsch-Gordan).
- d. Montrer alors que le niveau $j = 1/2$ se sépare en deux sous-niveaux Stark dont on donnera l'énergie par rapport au niveau non perturbé.
- e. Représenter sur un diagramme d'énergie la structure Stark du niveau $n = 2$.
- f. Jusqu'à quelle valeur du champ électrique peut-on considérer cette situation (champ faible) comme valable (structure fine de $n = 2 : 0.36 \text{ cm}^{-1}$)?