Université Paris-Sud, Orsay **L3 PAPP**

PHYS A302 Physique Quantique

Examen du 6 janvier 2016 (9.30h - 11.30h)

Aucun document n'est autorisé, pas plus que téléphone portable ou calculatrice

1 Effet Zeeman dans l'atome d'hydrogène

Les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène sont

$$E_n = \frac{E_0}{n^2}, \quad n = 1, 2, \ldots$$

avec $E_0 = -13,6$ eV. Les états propres associés sont notés $|n, l, m\rangle$, où n indexe les niveaux d'énergies (valeurs propres de l'hamiltonien $\hat{H}_0$), et l, m sont les nombres quantiques associés au moment orbital de l'électron $\hat{\vec{L}}$. On a donc

$$\hat{H}_0|n, l, m\rangle = E_n|n, l, m\rangle,$$

$$\hat{L}^2|n, l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|n, l, m\rangle,$$
$$\hat{L}_z|n, l, m\rangle = m\hbar|n, l, m\rangle.$$

On rappelle que pour n donné, l peut prendre les valeurs $1, 2, \ldots, n-1$. Et pour l fixé, m peut valoir $-l, -l+1, \ldots, l-1, l$.
Nous allons uniquement considérer les états pour lesquels $n = 1$ et $n = 2$.

1. Pour $n = 1$, quelles sont les valeurs possibles de l et m ? Écrire tous les états $|1, l, m\rangle$ correspondants. Quelle est la dégénérescence de E_1 ?
2. Pour $n = 2$, quelles sont les valeurs possibles de l et m ? Écrire tous les états $|2, l, m\rangle$ correspondants. Quelle est la dégénérescence de E_2 ?
3. Quelle est la longueur d'onde associée à la transition entre les états donnés par $n = 2$ et $n = 1$?
   On donne $\hbar = 1,05.10^{-34}$ J.s et 1 eV $= 1,6.10^{-19}$ J.

   On plonge maintenant cet atome dans champ magnétique constant $\vec{B} = B_0\vec{u}_x$. L'hamiltonien d'interaction entre l'atome et le champ magnétique est

   $$\hat{H}_{\text{int},1} = -\gamma\hat{\vec{L}} \cdot \vec{B} = -\gamma B_0 \hat{L}_x.$$

   On introduit les opérateurs

   $$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y,$$

dont on rappelle l'action sur les états $|n, l, m\rangle$:

$$\hat{L}_+|n, l, m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}|n, l, m+1\rangle,$$

$$\hat{L}_-|n, l, m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}|n, l, m-1\rangle.$$

4. Exprimer $\hat{L}_x$ en fonction de $\hat{L}_+$ et $\hat{L}_-$. En déduire l'expression de $\hat{H}_{\text{int},1}$ en fonction de ces opérateurs.
5. L'hamiltonien total est donné par $\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int},1}$. Écrire l'action de $\hat{H}_1$ sur les états $|n, l, m\rangle$ listés aux questions 1 et 2. Lesquels sont états propres de $\hat{H}_1$? On notera $b = \gamma B_0 \hbar$.
6. Écrire la matrice de $\hat{H}_1$ dans la base des états précédents.
7. Quelles sont les énergies propres de $\hat{H}_1$?
   Remarque : on ne demande pas ici de calculer les vecteurs propres de $\hat{H}_1$.
8. Représenter ces énergies en fonction de B_0 sur un graphe. Observe-t-on une levée de dégénérescence du niveau d'énergie E_2 ?
9. Quelles sont les longueurs d'onde que l'on peut maintenant observer pour des transitions entre les états pour lesquels $n = 2$ et $n = 1$?

On applique maintenant un champ magnétique $\vec{B} = B_0 \vec{u}_z$. L'hamiltonien d'interaction devient :

$$\hat{H}_{\text{int},2} = -\gamma B_0 \hat{L}_z.$$

L'hamiltonien total est $\hat{H}_2 = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int},2}$.

10. Écrire l'action de $\hat{H}_2$ sur les états $|n, l, m\rangle$ donnés aux questions 1 et 2.
11. Montrer que cet hamiltonien est diagonal dans cette base. Quelles sont les énergies propres associées ? Sont-elles les mêmes que celles obtenues précédemment pour un champ selon $\vec{u}_x$? Pourquoi ?

2 Particule dans un champ de force central.

Partie A. Solution variationnelle pour l'état fondamental

On cherche une solution pour l'état fondamental d'un hamiltonien $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}(r)$ où $V(r)$ ne dépend pas des angles θ et ϕ. On se propose d'employer la méthode dite variationnelle, et chercher une solution de la forme

$$\phi_0(r, \theta, \phi) \quad = \quad Ae^{-\lambda r} \qquad \text{pour} \qquad 0 \leq r < \infty$$

où λ est un réel positif que l'on cherche à déterminer en fonction du potentiel V.

On rappelle qu'en coordonnées sphériques, l'action de opérateur laplacien sur une fonction qui ne dépend pas des angles θ et ϕ, est donnée par

$$\Delta f(r) = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2} r f(r)$$

.

1. Calculer la constante de normalisation A en fonction de λ à un facteur de phase près. (On rappelle que l'élément de volume dτ d'une peau sphérique de rayon r et d'épaisseur dr est $d\tau = 4\pi r^2 dr$.) On donne la formule suivante pour n entier et $c > 0$: $\int_0^\infty y^n e^{-y/c} dy = n! \;\; c^{n+1}$.
2. Donner la définition de la valeur moyenne dans l'état ϕ_0 d'une observable $\mathcal{O}$ qui est fonction uniquement de la variable r.
3. Calculer la valeur moyenne de l'énergie cinétique, $\langle \hat{T} \rangle_0$ en fonction de λ.
4. On considère un potentiel de la forme $V(r) = -K/r$. Exprimer la valeur moyenne de l'énergie potentielle $\langle \hat{V} \rangle_0$ dans l'état ϕ_0 , en fonction de λ.
5. Ecrire la valeur moyenne dans l'état ϕ_0 de l'hamiltonien, $\langle \hat{H} \rangle_0$. Montrer que la valeur de λ qui minimise celle-ci est $\lambda = mK/\hbar^2$.
6. Vérifier, en l'injectant dans l'équation de Schrödinger indépendante du temps, que la solution ϕ_0 correspondant à cette valeur de λ est une fonction propre de $\hat{H}$. Donner la valeur propre correspondante, E_0 en fonction de K.

Pour les questions qui suivent, on rappelle que l'expression complète du laplacien dans cette base est

$$\begin{aligned}
\Delta &= \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}, \qquad \text{ou} \\
\hat{L}^2 &= -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi^2}\right)
\end{aligned}$$

7. Montrer que $\hat{L}^2\phi_0 = 0$. Quelle est la valeur du nombre quantique orbital l pour cet état ?

Partie B. Fonctions d'onde des états excités

Dans cette partie nous allons considérer deux états excités de cette particule. Ces états sont dégénérés, et leurs fonctions d'onde sont de la forme

$$\phi_k(r,\theta,\phi) = R(r)g_k(\theta,\phi)$$

où $k = 1, 2$. La valeur de λ est celle déterminée dans la question A5. La partie radiale est donnée par $R(r) = Bre^{-\lambda r/2}$, et les fonctions angulaires sont données par

$$\begin{aligned}
g_1(\theta,\phi) &= C_1 \sin\theta \sin\phi \\
g_2(\theta,\phi) &= C_2 \sin\theta \cos\phi
\end{aligned}$$

où C_k, réels, sont des constantes de normalisation définies telles que $\int d\Omega |g_k|^2 = 1$. On rappelle que l'élément de volume s'écrit $\int r^2 dr \int d\Omega$ où $\int d\Omega = \int \sin\theta d\theta \int d\phi$.

1. Ecrire la condition de normalisation pour les fonctions ϕ_k.
2. Calculer la constante de normalisation B.
3. Montrer que les $\phi_k(r,\theta,\phi)$ sont orthogonales à la fonction d'onde ϕ_0 de la partie précédente. *Indice : le produit scalaire en coordonnées sphériques s'écrit :* $\langle f|g\rangle = \int r^2 dr \int \sin\theta d\theta \int d\phi \quad f(\vec{r})^* g(\vec{r})$.
4. Montrer que ϕ_1 et ϕ_2 sont mutuellement orthogonales.
5. Montrer que $\hat{L}^2 g_1(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1)g_1$ et préciser la valeur de l. Faire de même pour g_2.
6. Est-ce que les g_k sont des fonctions propres de l'opérateur $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$?
7. Est-ce que des combinaisons linéaires de ces états sont fonctions propres de $\hat{L}_z$?