

---

## M1-Physique 2018-2019, Mécanique Quantique et Physique Atomique

1 feuille manuscrite RV autorisée, 3h

Les parties 1 (10pts) et 2 (10pts) doivent être rédigées sur des copies séparées

---

### 1. Orbitales atomiques & théorie des perturbations

On considère le modèle de l'atome d'Hydrogène décrivant l'état spatial d'un électron en orbite autour d'un proton, on note :  $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

A. Les niveaux d'énergie de  $\hat{H}_0$  sont :  $E_n = -\mathcal{R}\frac{Z^2}{n^2}$  avec  $\mathcal{R} = \frac{m}{2\hbar^2}(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0})^2 = 13,6$  eV (le nombre de protons  $Z = 1$  sauf pour la question G). Quelle est la dégénérescence du niveau d'énergie  $E_n$ ? A quoi est liée : (i) la dégénérescence en  $l$ , (ii) la dégénérescence en  $m$  (précisez la grandeur conservée)?

B. Les premiers états propres de  $\hat{H}_0$ ,  $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  sont :

$$\begin{aligned} R_{1,0}(r) &= 2 \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} e^{-r/a} & Y_{0,0}(\theta, \varphi) &= 1/\sqrt{4\pi} \\ R_{2,0}(r) &= 2 \left(\frac{1}{2a}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}} & Y_{1,0}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ R_{2,1}(r) &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{2a}} & Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}. \end{aligned}$$

où  $a = \hbar^2\epsilon_0/Z\pi m e^2$  est le rayon de Bohr,  $l : 0 \rightarrow n-1$ ,  $m : -l \rightarrow l$ . De quels (autres) opérateurs caractéristiques les fonctions  $Y_{l,m}$  sont elles des états propres, quelles en sont les valeurs propres.

C. L'effet Stark est la levée de dégénérescence des niveaux d'énergie d'un atome d'Hydrogène en présence d'un champ électrique  $\mathcal{E}$ . Ce champ doit être assez fort pour négliger les effets de structure fine, mais pas trop fort pour ne pas ioniser l'atome. Rappeler ce qu'est la structure fine de l'atome d'Hydrogène.

D. Soit  $\hat{H}_1 = ez\mathcal{E}$  la modification de l'Hamiltonien  $\hat{H}_0$  en présence de  $\mathcal{E}$  (selon  $z$ ). On traite  $\hat{H}_1$  comme une perturbation. Donner la modification d'énergie des niveaux  $E_1$  ( $n=1$ ) et  $E_2$  ( $n=2$ ) au premier ordre des perturbations.

On rappelle que :  $\int_0^{+\infty} x^4(1-x/2)e^{-x} dx = -36$  et  $\int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = 2/3$ .

E. On place maintenant l'atome d'hydrogène dans un champ magnétique  $B_{0,z}$  (constant). On note  $\vec{M} = \gamma \vec{S}$  le moment magnétique (avec  $\gamma = g\mu_B$  où  $\mu_B$  est le magnéton de Bohr) et  $|+z\rangle, |-z\rangle$  les états propres de la projection  $\hat{S}_z$  du spin suivant l'axe  $z$ . Montrer que la présence de  $B_z$  lève la dégénérescence du niveau  $E_1$  ( $n = 1$ ) (effet Zeeman). Quel opérateur devrait-on considérer pour calculer cet effet pour  $n > 1$ .

F. On rajoute un champ magnétique oscillant  $\vec{B}_1$  dans le plan perpendiculaire à  $B_{0,z}$  ( $B_{1x} = B_1 \cos(\omega t)$  et  $B_{1y} = B_1 \sin(\omega t)$  avec  $B_1 \ll B_0$ ). Donner l'expression de la matrice  $2 \times 2$  représentant  $\hat{H}_{spin}(t)$  dans la base  $\{|+z\rangle, |-z\rangle\}$ <sup>1</sup>. On note  $P_{+-}(t)$  la probabilité de transition vers l'état  $|-z\rangle$  à l'instant  $t$ , sachant qu'à  $t = 0$ , il était dans l'état  $|+z\rangle$ . En traitant  $\vec{B}_1$  comme une perturbation, montrer que :  $P_{-+} \approx (\frac{\mu_B B_1}{\hbar})^2 |\int_0^t e^{i\omega_0 t} dt|^2$  (préciser la valeur de  $\omega_0$ ). Discuter la possibilité d'une résonance et préciser la dépendance temporelle si  $\omega_0 \neq 0$ .

G. On s'intéresse désormais au passage de  $Z$  à  $Z + 1$  d'un atome hydrogénoïde contenant  $Z$  protons. Exprimez l'Hamiltonien  $\hat{H}_0(Z + 1)$  en fonction de  $\hat{H}_0(Z)$  et d'un terme  $W$  que l'on explicitera. Utilisez la théorie des perturbations au premier ordre pour calculer le changement d'énergie  $\Delta E_0^{(1)}$  de l'état fondamental correspondant au passage de  $Z$  à  $Z + 1$  (on suppose donc ici que  $W \ll \hat{H}_0(Z)$ ). Comparez ce résultat au calcul exact.

---

1. on rappelle que :  $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  et  $\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$  et  $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ .

## 2 : Un ensemble d'atomes de sodium (écrire sur une nouvelle copie)

Nous allons considérer le cas d'un atome de sodium (Na) qui a une masse de  $3.8 \times 10^{-26}$  kg. Cet atome peut être considéré comme un système à deux niveaux : un niveau fondamental  $|g\rangle$  et un niveau excité  $|e\rangle$ . La longueur d'onde d'absorption et d'émission correspondante à cette transition est de  $\lambda_{Na} = 589$  nm.

Un atome de sodium isolé et au repos représente un profil spectral d'absorption et émission qui correspond à une distribution Lorentzienne de largeur en fréquence d'environ 10 MHz (FWHM) (appelé la largeur "naturelle").

**A.** A quoi est due cette largeur non-nulle ?

**B.** Qualitativement, comment est modifié ce profil (allure et largeur) quand l'atome étudié fait partie d'un gaz d'atomes relativement dense mais ultrafroids ?

**C.** Même question, mais dans le cas d'une densité très faible, et à température ambiante ? Estimer la largeur du profil dans ce cas là.

**D.** Nous souhaitons décrire l'évolution d'un atome de sodium soumis à des collisions au sein de cet ensemble. Expliquer pourquoi l'approche basée sur une fonction d'onde n'est pas pertinente ici.

**E.** Rappeler l'équation d'évolution de l'opérateur densité décrivant l'ensemble des atomes sous l'effet d'un Hamiltonien  $H_0$ .

**F.** On note  $H_0$  le Hamiltonien d'un système constitué d'un atome de sodium à deux niveaux. En choisissant l'origine des énergies à la moyenne des énergies des deux niveaux, et en notant  $\hbar\omega_{Na}$  leur écart énergétique, écrire explicitement la matrice représentant  $H_0$  dans la base  $(|g\rangle; |e\rangle)$ .

**G.** En déduire les équations d'évolution libre des éléments de la matrice densité  $\rho_{gg}$ ,  $\rho_{ge}$ ,  $\rho_{eg}$  et  $\rho_{ee}$ .

**H.** On va maintenant prendre en compte le fait que le système, dans l'état excité, peut retomber dans l'état fondamental sous l'effet de l'émission spontanée, avec une probabilité par unité de temps  $\Gamma$ . Réécrire les équations d'évolution libre des populations et des cohérences en y ajoutant le terme correspondant à l'émission spontanée. Vérifier que la trace de la matrice densité est conservée.

**I.** A température ambiante, l'énergie thermique des atomes peut-elle exciter les atomes via collisions ? (donner des arguments quantitatifs). Quelle est l'ordre de grandeur de la température minimale pour que cela se produise ?

Imaginons que les atomes subissent exclusivement des collisions élastiques. La probabilité pour un atome de subir une collision par unité de temps est notée  $\gamma$ .

**J.** Comment se traduit, sur les équations d'évolution des populations, l'hypothèse que les collisions sont élastiques ? Quel sera l'effet de ces collisions sur les cohérences ? Ecrire les nouvelles équations d'évolution complètes des cohérences.

La suite de cet exercice repose également fortement sur ce que vous avez vu dans les cours et TD “interaction atome-lumière” pour un système à deux niveaux, mais vous allez ici ajouter un troisième niveau.

Nous allons rajouter un troisième niveau, nommé  $|a\rangle$  (auxiliaire). De cette manière, les états propres du Hamiltonien non-perturbé  $H_0$  d’un atome sont  $|g\rangle$ ,  $|e\rangle$  et  $|a\rangle$ . On introduit, pour mesurer leurs énergies respectives, les pulsations  $\omega_g$ ,  $\omega_e$  et  $\omega_a$ , telles que  $H_0|g\rangle = \hbar\omega_g|g\rangle$ , etc.

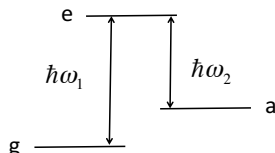


FIGURE 1 – Atome à trois niveaux. Nous avons défini :  $\omega_1 = \omega_e - \omega_g$  et  $\omega_2 = \omega_e - \omega_a$ .

Tout vecteur d’état  $|\psi(t)\rangle$  peut être décomposé sur la base des états stationnaires ( $|g\rangle, |e\rangle, |a\rangle$ ). On note  $\alpha, \beta, \gamma$  les coefficients de cette décomposition en “représentation d’interaction”, c’est-à-dire telle que  $|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-i\omega_g t}|g\rangle + \beta e^{-i\omega_e t}|e\rangle + \gamma e^{-i\omega_a t}|a\rangle$ .

On suppose que  $|g\rangle$  et  $|a\rangle$  ont la même parité et que la parité de  $|e\rangle$  est opposée à la parité commune de  $|g\rangle$  et  $|a\rangle$ .

**K.** Indiquer, parmi les six éléments non-diagonaux de l’opérateur  $d_x$  (dipôle électrique de l’atome suivant la direction  $Ox$ ) quels sont les quatre d’entre eux qui sont non-nuls. En déduire qu’il y a une transition interdite dans ce système à trois niveaux (si on ne considère que le couplage dipolaire électrique entre l’atome et la lumière).

**L.** On éclaire l’atome avec de la lumière polarisée rectilignement suivant l’axe  $Ox$ , dans laquelle le champ électrique est décrit par la fonction  $E(t)$ . Ecrire le hamiltonien  $H$  ( $H_0$  plus l’interaction dipolaire électrique) pour le système et l’appliquer sur l’état  $|\psi(t)\rangle$ .

**M.** Ecrire l’équation de Schrödinger dépendant du temps en utilisant le résultat de la question précédente et en développant la dérivée temporelle de  $|\psi(t)\rangle$ .

**N.** Projeter cette équation sur respectivement  $|g\rangle$ ,  $|e\rangle$  et  $|a\rangle$ , pour obtenir le système d’équations linéaires qui donne, en fonction de  $\alpha, \beta$  et  $\gamma$ , les dérivées par rapport au temps  $\dot{\alpha}, \dot{\beta}$  et  $\dot{\gamma}$  (utiliser le résultat de la question K pour éliminer rapidement les termes nuls). On pourra noter  $\langle g|d_x|a\rangle = d_1$  et  $\langle e|d_x|a\rangle = d_2$  et supposer ces éléments de matrice réels.