CORRECTION Interaction Electron-champs Electrique (7)

On considère un atome d'hydrogène, interagissant avec une onde électromagnétique. Cette interaction induit plusieurs forces sur l'électron. Une force d'interaction avec le champ (qE) qui tend à « éloigné » l'électron et une force de rappel (Ar) qui tend à le faire osciller sur son orbite à la manière d'un oscillateur harmonique (vision classique).

Le Hamilonien du système s'écrit :

$$H=H_0 + H_E + V_{rap}$$

Ou H_0 est l'Hamiltonien non perturbé de l'atome, H_E le Hamiltonien d'interaction avec le champ E et $V_{rap}(r^2)$, le Hamiltonien associé à la force de rappel. Dans cet exercice, nous allons intéresser uniquement à l'hamiltonien associé à la force de rappel induite par l'onde électromagnétique et comparer la description classique à la description quantique de cette oscillation en supposant $H_E << V_{rap}$.

Traitement Classique

La solution générale de l'équation du mouvement pour un oscillateur harmonique s'écrit :

$$q_{classique}=A\sin(\omega t+\delta)$$

a) Quel est la nature du mouvement. (Période, déphasage…)

   Rep : Trivial

b) Donner l'expression de l'impulsion p pour cet oscillateur de masse m.

   Rep : $\vec{p}=m\vec{v}$ à une dimension $p=mv$ avec $v=dq/dt=A\omega\cos(\omega t+\delta)$

c) Donner l'expression de l'énergie mécanique du système $E_{classique}$.

   Rep : $E=Ec+Ep=0.5m(dq/dt)^2+0.5kq^2=\ldots$

   D'ou $E=0.5m\omega^2A^2\cos^2(\omega t+\delta) + 0.5A^2k\sin^2(\omega t+\delta)=m\omega^2A^2/2$ (note : $\omega^2=k/m$)

d) Donner les valeurs moyennes $q_{classique}$, $p_{classique}$ par rapport au temps. On les notera $<q>_c$ et $<p>_c$

   Rep : $<\sin>=<\cos>=0$ par rapport au temps.

e) Donner les valeurs moyennes $<q^2>$ et $<p^2>$ en fonction de $E_{classique}$ trouvée à la question c, montrer que les énergies cinétique moyenne et potentielle moyenne de l'oscillateur sont égales

   Rep : $<\cos^2>=<\sin^2>=1/2$ d'où $<q^2>=E/m\omega^2$ et $<p^2>=mE$

   Note : la conservation de l'énergie mécanique impose E(Ec=0, Ep=max)=E(Ec=max, Ep=0) car forces conservative. D'où $<Ec>=<Ep>=$ on en déduit également que $\omega^2=k/m_e$

Traitement Quantique de l'oscillateur

Le Hamiltonien de l'électron soumis à la force de rappel s'écrit :

$$H_{rap} =1/2(P^2+Q^2) \text{ avec } Q=q(m\omega/\hbar)^{1/2} \text{ et } P=p(1/m\hbar\omega)^{1/2}.$$

Soit $|n>$ les états propres associés à l'oscillateur. Les énergies du système s'écrivent $E_n=(n+1/2)\hbar\omega$

Contrairement au cas classique les observables impulsions p et position q n'ont pas de valeurs définies. Elles sont dans cette description quantique associées à des distributions statistiques.

a) Soit les opérateurs $a=(1/2)^{1/2}[Q+iP]$ et $a^{+}=(1/2)^{1/2}[Q-iP]$. Exprimer H en fonction a et a^{+}. On donnera également l'expression de q et de p en fonction de a et a^{+}.

Les valeurs propres de a et a+ dans la base des {|n>} s'écrivent :

$a^{+}\ |n\rangle = (n+1)^{1/2}\ |n+1\rangle$ (1)

$a\ \ |n\rangle = n^{1/2}\ |n-1\rangle$ (2)

Rep :$H=0.5(aa^{+} + a^{+}a) = 0.5[Q^2+P^2]$

rque attention l'ordre des opérateurs a,a^{+} est important dans le cas gnl.

on a également : $p=i(h/2m\omega)^{1/2}[a^{+} + a]$ et $q=i(mh\omega/2)^{1/2}[a^{+}-a]$

b) Donner l'expression, en notation de Dirac, des éléments de matrice associés à p et de q sur la base des états propres {|n>}.

$\langle n'|H|n\rangle=1/2\langle n'|aa^{+} + a^{+}a|n\rangle=1/2\ [\langle n'|aa^{+}|n\rangle + \langle n'|a^{+}a|n\rangle]$

Avec

$\langle n'|aa^{+}|n\rangle = \langle n'|a\ (n+1)^{1/2}\ |n+1\rangle = (n+1)\langle n'|n\rangle = (n+1)\ \delta(n',n)$

$\langle n'|a^{+}a|n\rangle = \langle n'|a^{+}\ n^{1/2}|n-1\rangle = n\langle n'|n\rangle =n\ \delta(n',n)$

D'où $\langle n'|H|n\rangle=0.5(2n+1)\ \delta(n',n)=(n+1/2)\ \delta(n',n)=En$ (à h/2PI près)

Note : h–>h/2PI

Quels sont les éléments de matrice correspondant aux valeurs moyennes de <p> et <q> les calculer. Comparer au cas classique.

Rep : Ce sont les éléments de matrice diagonaux seuls non nul (n=n'). Contrairement au cas classique la valeur moyenne n'est pas nulle !

c) Que vaut $\langle n|n'\rangle$? En déduire l'expression des éléments de matrice $\langle n|q^2|n'\rangle$ et $\langle n|p^2|n'\rangle$ en fonction de E_n.

Rep : 0 car |n> et |n'> sont des vecteurs de base orthogonaux. On utilise l'expression de q et p en fonction de a et a^{+} en remarquant que $q^2=(h/m\omega)a^{+}a$ et $p^2=mh\omega a+a$ d'où il vient $\langle p^2\rangle=mhEn$ et $\langle q^2\rangle=En/(hm\omega)$

Note : h–>h/2PI

d) Comparer au cas classique et discuter de l'équivalence Quantique / Classique pour l'oscillateur.

Rep : On retrouve les expressions de $\langle p^2\rangle$ et $\langle q^2\rangle$ du cas classique mais avec cette fois ci l'énergie quantifiée

1 - $\hat{H}_{HF} = A\,\hat{I}.\hat{J}$ $\qquad \hat{F} = \hat{I} + \hat{J}$

Calcul dans la base "couplée" : états propres communs à (I^2, J^2, F^2, F_3).

$$\hat{I}\hat{J} = \frac{1}{2}\left[\hat{F}^2 - \hat{I}^2 - \hat{J}^2\right].$$

$$\Delta E_{HF} = \frac{A\hbar^2}{2}\left[F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)\right].$$

2 - $n = 2$ $\begin{cases} \ell = 0 & j = \frac{1}{2} & 2s_{1/2} \\ \ell = 1 & j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2} & 2p_{1/2} \quad 2p_{3/2} \end{cases}$

structure hyperfine : $|I - j| \leq F \leq I + j$

$2s_{1/2} \to F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ $\qquad A\hbar^2 = 81{,}7 \times \dfrac{1}{\frac{1}{2}\frac{3}{2} \times 8\ \frac{1}{2}} = \dfrac{81{,}7}{3} \simeq 27{,}23\ MHz$

pts

$2p_{1/2} \to F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ $\qquad A\hbar^2 = 81{,}7 \times \dfrac{1}{\frac{1}{2}\frac{3}{2} \times 8 \times \frac{3}{2}} = \dfrac{81{,}7}{9} \simeq 9{,}077\ MHz$

$2p_{3/2} \to F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ $\qquad A\hbar^2 = 81{,}7 \times \dfrac{1}{\frac{3}{2}\frac{5}{2} \times 8 \times \frac{3}{2}} = \dfrac{81{,}7}{45} \simeq 1{,}815\ MHz$

3 - Calcul de la correction énergétique associée à interaction hyperfine

$2s_{1/2}$ $\quad F = \frac{1}{2}$ $\qquad \Delta E_{HF} = \dfrac{27{,}23}{2}\left[\cancel{\tfrac{1}{2}\tfrac{3}{2}} - 2 - \cancel{\tfrac{1}{2}\tfrac{3}{2}}\right] = -27{,}23\ MHz.$

$F = \frac{3}{2}$ $\qquad \Delta E_{HF} = \dfrac{27{,}23}{2}\Big[\underbrace{\tfrac{3}{2}\tfrac{5}{2} - 2 - \tfrac{1}{2}\tfrac{3}{2}}_{1}\Big] = +\dfrac{27{,}23}{2} = 13{,}61$

$2p_{1/2}$ $\quad F = \frac{1}{2}$ $\qquad \Delta E_{HF} = \dfrac{9{,}077}{2}\left[\cancel{\tfrac{1}{2}\tfrac{3}{2}} - 2 - \cancel{\tfrac{1}{2}\tfrac{3}{2}}\right] = -9{,}077$

$F = \frac{3}{2}$ $\qquad \Delta E_{HF} = \dfrac{9{,}077}{2}[\ 1\ ] = \dfrac{9{,}077}{2} = 4{,}54$

$2p_{3/2}$

$F = \frac{1}{2}$ $\qquad \Delta E_{HF} = \dfrac{1{,}815}{2}\left[\tfrac{1}{2}\tfrac{3}{2} - 2 - \tfrac{3}{2}\tfrac{5}{2}\right] = \dfrac{1{,}815}{2} \times (-5) = -4{,}54$

$F = 3/2$ $\qquad \Delta E_{HF} = \dfrac{1{,}815}{2}\left[\cancel{\tfrac{3}{2}\tfrac{5}{2}} - 2 - \cancel{\tfrac{3}{2}\tfrac{5}{2}}\right] = -1{,}815$

$2p_{3/2}$ $F = \frac{5}{2}$ $\Delta E_{HF} = \frac{1,815}{2}\left[\frac{5}{2}\frac{7}{2} - 2 - \frac{3}{2}\frac{5}{2}\right] = 2,72 \text{ MHz}$

4- Effet LAMB ⇒ structure hyperfine de $n = 2$

Structure fine = ?

$$\Delta E_{SF} = \frac{+mc^2Z^4\alpha^4}{2n^3}\left[\frac{3}{4n} - \frac{2}{2j+1}\right].$$

pour $n = 2$ $\quad \frac{mc^2Z^4\alpha^4}{2n^3} = \frac{3,29.10^9 \times \left(\frac{1}{137}\right)^2 \times 1^2}{8} = 2,19\,10^4 \text{ MHz}$

pts $n = 2$ $j = \frac{1}{2}$ $(2s_{1/2}, 2p_{1/2})$ $\Delta E_{SF} = 2,19.10^4\left[\frac{3}{8} - \frac{2}{1+1}\right] = -1,37.10^4$

$j = \frac{3}{2}$ $(2p_{3/2})$ $\Delta E_{SF} = 2,19.10^4\left(\frac{3}{8} - \frac{2}{3+1}\right) = -0,27.10^4$

d'où le diagramme :