

Mécanique quantique – L3

Emmanuel Baudin – Tom Bienaimé – Sylvain Nascimbène

TD 9 : Effet Stark de l'atome d'hydrogène

1 Hamiltonien Stark et perturbation

On considère l'atome d'hydrogène placé dans un champ électrique extérieur statique et uniforme \mathbf{E} dirigé suivant \mathbf{u}_z . On ne prend pas en compte le spin de l'électron, et on suppose le proton infiniment lourd. Le Hamiltonien de perturbation \hat{V} est de la forme $\hat{V} = -q\vec{E} \cdot \hat{\mathbf{R}}$ où q est la charge électrique (négative) de l'électron.

1. Rappeler l'expression des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène en l'absence de champ extérieur, leur dégénérescence, ainsi que la forme des états stationnaires. On notera \hat{H}_0 le Hamiltonien correspondant.
2. Quelle condition \hat{V} doit-il vérifier pour pouvoir être traité en perturbation ? Vérifier que cette condition est satisfaite pour l'état fondamental et les champs réalisables au laboratoire (de l'ordre de 10^5V cm^{-1})
3. Quelle est la parité de l'opérateur \hat{V} ? Que peut-on en déduire sur ses éléments de matrice entre les états stationnaires de \hat{H}_0 ?

2 Effet Stark du niveau $n = 1$

1. Montrer que la correction d'ordre 1 à l'énergie est nulle.
2. On veut calculer l'effet de la perturbation à l'ordre supérieur.
 - (a) Calculer la correction à l'ordre 2 de l'énergie.
 - (b) Quel est son signe ? Sa dépendance en E ?
 - (c) Calculer le dipôle induit par le champ. Interpréter ce résultat en termes de polarisabilité.
 - (d) La correction en énergie est-elle nécessairement négative pour un état ns (avec $n \neq 1$) ?

3 Effet Stark du niveau $n = 2$

1. Représenter la restriction de V au sous-espace $n = 2$. On ne cherchera pas à calculer l'intégrale radiale des éléments de matrice non nuls, et on posera

$$\langle 2, 0, 0 | -qE\hat{z} | 2, 1, 0 \rangle = E\alpha$$

2. Donner les états propres et les énergies propres au premier ordre de perturbation.
3. On place l'atome initialement dans l'état $|2, 0, 0\rangle$ dans un champ électrique statique. Décrire l'évolution ultérieure du système. Représenter l'allure de la fonction d'onde au cours du temps.
4. Pourquoi cet effet Stark linéaire est-il typique de l'atome d'hydrogène ? (*On rappelle que pour l'état $1s$ de l'atome d'hydrogène : $R_{1s} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$*)

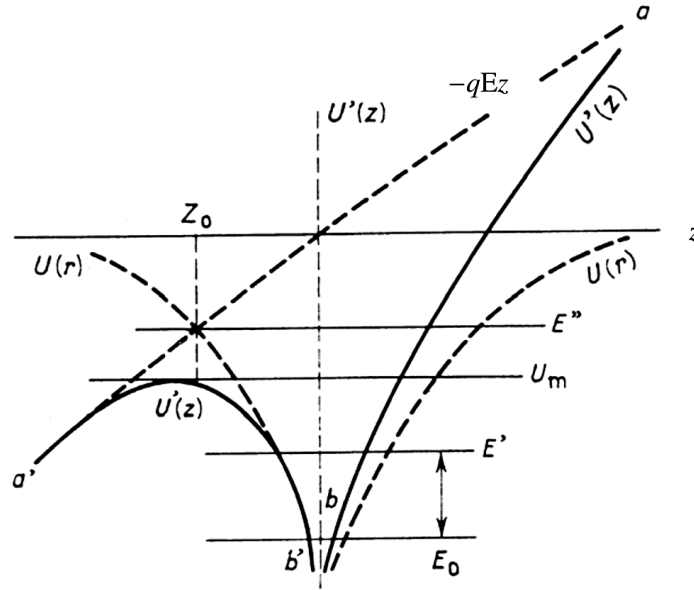


FIGURE 1 – Addition des champs atomique et extérieur.

4 Ionisation de l'atome dans les champs électriques intenses

Soit $U(r)$ l'énergie de l'électron en l'absence de champ extérieur et supposons le champ électrique extérieur \vec{E} dirigé suivant l'axe Oz . L'énergie potentielle totale de l'électron est alors égale à

$$U'(r) = U(r) - qEz.$$

La figure 1 représente la forme de la courbe de potentiel le long de l'axe Oz ($x = y = 0$, $r = |z|$). En l'absence de champ extérieur, $U(r)$ est tracé en pointillé. L'énergie complémentaire $-qEz$ dans le champ extérieur est représentée par la droite aa' . $U'(r)$ s'obtient par addition des ordonnées et est représentée en trait plein (courbes $a'b'$ et ab).

On voit qu'au voisinage du point z_0 il se forme une barrière de potentiel partageant l'espace en deux régions : une région interne $z > z_0$ et une région externe $z < z_0$ dans chacune desquelles l'énergie potentielle $U'(r)$ est inférieure à $U'(z_0) = U_m$. Considérons les deux niveaux d'énergie E' et E'' .

- Que se passe-t-il si l'énergie E de l'électron est telle que :
 - $E = E'' > U_m$?
 - $E = E'' < U_m$? Peut-on faire une analogie avec un phénomène bien connu pour les métaux ou avec le modèle de Gamow de l'émission radioactive α ?
- Pour un champ électrique intense, les deux cas a) et b) envisagés précédemment conduisent au même phénomène physique. Lequel ? En est-il de même si le champ électrique extérieur est de faible intensité ? Pourquoi ?
- La photographie 2 montre la décomposition spectrale de la série de Balmer de l'hydrogène (H_β : transition $n = 4 \rightarrow n = 2$, H_γ : transition $n = 5 \rightarrow n = 2$, H_δ : transition $n = 6 \rightarrow n = 2$, H_ϵ : transition $n = 7 \rightarrow n = 2$) dans les champs électriques croissants de bas en haut depuis zéro jusqu'à une valeur de 10^6 V cm^{-1} , les lignes blanches horizontales étant les lignes de champ constant.

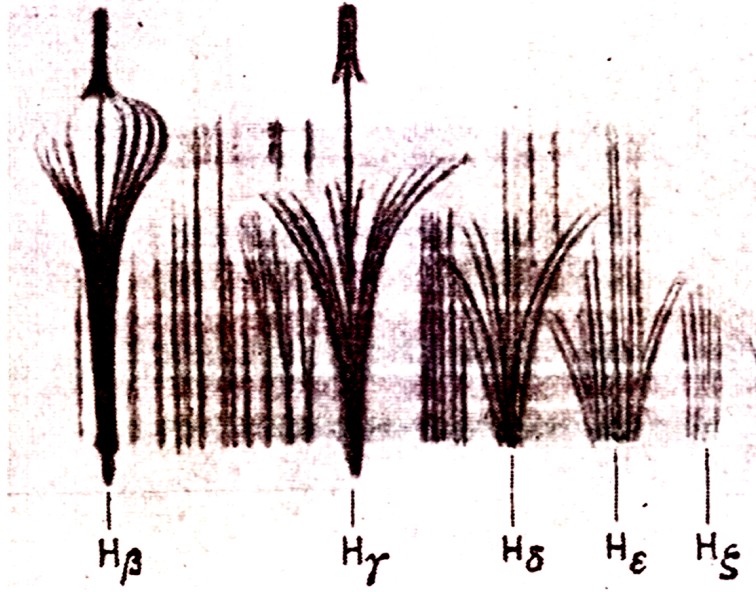


FIGURE 2 – Photographie de la mort des raies de Balmer sous fort champ électrique. Abscisse : énergie, ordonnée : amplitude du champ électrique. Champ maximal $\sim 1.4 \text{ MV cm}^{-1}$. D'après : Trautenberg H.R.V. and Gebauer R. : Z.Phys **54**, 307 ; **56**, 1929, ; **62**, 289,(1930)

La photographie de la figure 2 montre que, dès le début, les raies se dissocient. Cette dissociation augmente à mesure de l'accroissement du champ (sur la dissociation de la raie H_β , il est aisé de voir la position de la ligne d'intensité maximale du champ). Pour une certaine valeur du champ, la raie spectrale disparaît. Expliquer cette disparition, sachant que la durée de vie d'un état excité (E' , par exemple, sur la figure 1) est de l'ordre de $\tau \simeq 10^{-8}\text{s}$.

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases}$$

$ 2, 0, 0\rangle \leftrightarrow \Psi_{2,0,0} = R_{2,0}(r)Y_0^0(\theta, \phi)$	$Y_0^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$R_{2,0}(r) = \sqrt{\frac{1}{2a_0^3}}e^{-\frac{r}{2a_0}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)$
$ 2, 1, 0\rangle \leftrightarrow \Psi_{2,1,0} = R_{2,1}(r)Y_1^0(\theta, \phi)$	$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos \theta$	$R_{2,1}(r) = \sqrt{\frac{1}{6a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}\frac{r}{2a_0}$
$ 2, 1, 1\rangle \leftrightarrow \Psi_{2,1,1} = R_{2,1}(r)Y_1^1(\theta, \phi)$	$Y_1^1(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin \theta e^{i\phi}$	
$ 2, 1, -1\rangle \leftrightarrow \Psi_{2,1,-1} = R_{2,1}(r)Y_1^{-1}(\theta, \phi)$	$Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin \theta e^{-i\phi}$	

Terme s	Termes p
$\Psi_{2,0,0} = \frac{R_{2,0}}{\sqrt{4\pi}} = f(r)$	$\Psi_{2,1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}R_{2,1}\frac{z}{r} = F(r)z$
	$\Psi_{2,1,1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}R_{2,1}\frac{x+iy}{r} = F(r)\frac{x+iy}{\sqrt{2}}$
	$\Psi_{2,1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}R_{2,1}\frac{x-iy}{r} = F(r)\frac{x-iy}{\sqrt{2}}$