

1<sup>er</sup> CONTRÔLE CLASSANT DU COURS DE PHYSIQUE PHY432

Lundi 30 mars 2009, durée : 2 heures

Documents autorisés : cours, recueil de problèmes, copies des diapositives, notes personnelles.

## Exercice : particules identiques piégées (sur 5 points)

On dispose d'un puits carré infini unidimensionnel de côté  $L$ . On y place  $N$  particules identiques de masse  $M$  et de spin  $s$  inconnu. Ces particules n'interagissent pas entre elles et le système est préparé dans son état fondamental. On rappelle que les énergies propres d'une particule dans ce puits sont  $E_n = n^2 E_1$ , avec  $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / (2ML^2)$  et  $n$  entier strictement positif.

1. On mesure l'énergie d'excitation  $E_{\text{ex}}$ , c'est-à-dire l'énergie minimale à apporter pour faire passer le système de son niveau fondamental à un niveau d'énergie strictement supérieure. En choisissant  $N = 5$ , on trouve égale à  $E_{\text{ex}} = 3 E_1$ . Cette valeur est-elle compatible avec :
  - (a) un spin  $s = 0$  ?
  - (b) un spin  $s = 1/2$  ?
  - (c) un spin  $s = 1$  ?
  - (d) un spin  $s = 3/2$  ?
2. On refait la même expérience avec  $N = 10$  particules. On trouve maintenant  $E_{\text{ex}} = 5 E_1$ . Déterminer le spin des particules.

## Problème : Interactions à longue portée entre atomes (sur 15 points)

On s'intéresse dans ce problème à l'interaction entre un atome d'hydrogène et son image miroir, ainsi qu'à celle entre deux atomes d'hydrogène. On rappelle l'énergie d'interaction électrostatique classique entre un dipôle  $\vec{d}_a$  et un dipôle  $\vec{d}_b$ , séparés par une distance  $D$  le long de l'axe  $Oz$  (voir figure 1a) :

$$W = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 D^3} (d_{x_a} d_{x_b} + d_{y_a} d_{y_b} - 2d_{z_a} d_{z_b}) . \quad (1)$$

Les états liés de l'atome d'hydrogène sont notés  $|n, \ell, m\rangle$  ou encore  $\psi_{n,\ell,m}(\vec{r})$ , où  $\vec{r}$  est le vecteur joignant le proton et l'électron ( $\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p$ ). Le nombre quantique principal  $n$  repère les niveaux d'énergie ( $E_n = -E_I/n^2$ ),  $\ell$  et  $m$  sont les nombres quantiques repérant le carré du moment cinétique et sa projection sur l'axe  $z$ . On a posé  $E_I = m_e e^4 / (2\hbar^2)$ ,  $e^2 = q_e^2 / (4\pi\epsilon_0)$ , où  $m_e$  et  $q_e$  sont respectivement la masse et la charge de l'électron ( $q_e < 0$ ). On rappelle que les états stationnaires s'écrivent  $\psi_{n,\ell,m}(\vec{r}) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$  en coordonnées sphériques (définies en fig. 1b). On rappelle également que les harmoniques sphériques sont orthonormées :  $\int Y_{\ell',m'}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'}$  et on donne

$$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi} \quad Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta . \quad (2)$$

Dans tout le problème, on néglige les effets liés aux spins de l'électron et du proton. La partie 3 utilise certains résultats de la partie 1 ; la partie 2 est indépendante des parties 1 et 3.

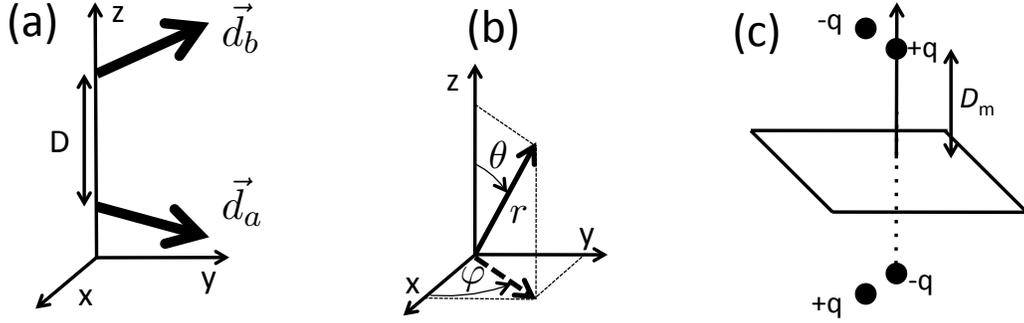


FIGURE 1 – (a) Dipôles  $a$  et  $b$  en interaction. (b) Définition des coordonnées sphériques, avec  $r \geq 0$ ,  $\theta \in [0, \pi]$ ,  $\varphi \in [0, 2\pi[$ . (c) Dipôle face à un miroir, avec son image électrique.

## 1 L'opérateur dipôle électrique et ses éléments de matrice

L'opérateur *dipôle électrique* est l'ensemble des trois opérateurs  $\hat{d}_x, \hat{d}_y, \hat{d}_z$ , définis par  $\hat{\vec{d}} = q_e \hat{\vec{r}}$ . On cherche à quelles conditions sur les différents nombres quantiques les éléments de matrice

$$\langle n', \ell', m' | \hat{\vec{d}} | n, \ell, m \rangle = q_e \int \psi_{n', \ell', m'}^*(\vec{r}) \vec{r} \psi_{n, \ell, m}(\vec{r}) d^3r \quad (3)$$

prennent des valeurs non nulles. On rappelle la définition de l'opérateur parité  $\hat{P}$  : son action sur une fonction d'onde  $\psi(\vec{r})$  quelconque est  $\hat{P}(\psi(\vec{r})) = \psi(-\vec{r})$ .

**1.1.** On s'intéresse dans la suite aux deux niveaux d'énergie  $n = 1$  et  $n = 2$ . Rappeler sans démonstration les valeurs possibles de  $\ell$  et  $m$  pour chacun de ces niveaux.

**1.2.** Évaluer l'action de  $\hat{P} \hat{\vec{r}} \hat{P}$  sur une fonction d'onde  $\psi(\vec{r})$ . En déduire que  $\hat{P} \hat{\vec{r}} \hat{P} = -\hat{\vec{r}}$ .

**1.3.** Les fonctions  $\psi_{n, \ell, m}$  vérifient par construction  $\hat{P}(\psi_{n, \ell, m}(\vec{r})) = (-1)^\ell \psi_{n, \ell, m}(\vec{r})$ . En utilisant le résultat précédent, en déduire que l'élément de matrice (3) est nul si  $\ell + \ell'$  est pair.

**1.4.** *Éléments de matrice de  $\hat{d}_z$  entre les niveaux 1s ( $n' = 1, \ell' = 0$ ) et 2p ( $n = 2, \ell = 1$ ).*

(a) En utilisant la dépendance de  $\psi_{1,0,0}$  et  $\psi_{2,1,m}$  vis-à-vis de  $\varphi$ , indiquer sans calcul pour quelle(s) valeur(s) de  $m$  l'élément de matrice (3) pour  $\hat{d}_z$  peut prendre une valeur non nulle.

(b) Retrouver le résultat précédent en évaluant le commutateur  $[\hat{L}_z, \hat{d}_z]$  et en examinant ses éléments de matrice entre  $\psi_{1,0,0}$  et  $\psi_{2,1,m}$ .

(c) Calculer l'élément de matrice  $\langle 1, 0, 0 | \hat{d}_z | 2, 1, m \rangle$  en fonction de  $m$ ,  $q_e$ ,  $a_1$  et  $C$ . On donne

$$\int R_{1,0}(r) R_{2,1}(r) r^3 dr = C a_1 \quad \text{avec } a_1 = \hbar^2 / (m_e e^2) : \text{rayon de Bohr}, \quad (4)$$

où  $C \simeq 1$  est un coefficient qu'on ne cherchera pas à calculer.

**1.5.** *Éléments de matrice de  $\hat{d}_x$  et  $\hat{d}_y$  entre les niveaux 1s et 2p.*

(a) *Les orbitales  $p_x, p_y, p_z$  du niveau 2p.* On introduit les deux états

$$\chi_{2px}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,-1}(\vec{r}) - \psi_{2,1,1}(\vec{r})) \quad \chi_{2py}(\vec{r}) = \frac{i}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,1}(\vec{r}) + \psi_{2,1,-1}(\vec{r})) \quad (5)$$

Expliquer sans calcul pourquoi les trois états  $\chi_{2px}, \chi_{2py}, \chi_{2pz}$  forment une base du niveau 2p (on a posé  $\chi_{2pz} = \psi_{2,1,0}$  pour uniformiser les notations).

(b) Montrer que l'état  $\chi_{2px}(\vec{r})$  est état propre de  $\hat{L}_x$  avec la valeur propre 0. On rappelle que  $\hat{L}_x = (\hat{L}_+ + \hat{L}_-)/2$  et  $\hat{L}_\pm Y_{\ell, m} = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} Y_{\ell, m \pm 1}$ .

- (c) Montrer de même par des arguments de symétrie que l'état  $\chi_{2py}(\vec{r})$  est état propre de  $\hat{L}_y$  avec la valeur propre 0.
- (d) En transposant le résultat de la question (1.4), en déduire la valeur des éléments de matrice de  $\hat{d}_x$  et  $\hat{d}_y$  entre l'état 1s et les trois états de base  $\chi_{2px}, \chi_{2py}, \chi_{2pz}$  du sous-niveau 2p.

## 2 L'atome face à son miroir

Un atome est placé une distance  $D_m$  d'un miroir plan parfaitement réfléchissant. On fait l'hypothèse que l'énergie d'interaction de l'atome avec le miroir correspond à l'énergie d'interaction du dipôle atomique avec son image électrique instantanée<sup>1</sup> (fig. 1c), ce qui conduit à :

$$\hat{W} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{16 D_m^3} \left( \tilde{d}_x^2 + \tilde{d}_y^2 + 2\tilde{d}_z^2 \right). \quad (6)$$

La distance  $D_m$  est fixée à une valeur constante. L'atome est préparé dans l'état interne 1s.

**2.1.** Expliquer sans calcul pourquoi les éléments de matrice  $\langle 1, 0, 0 | \hat{d}_i^2 | 1, 0, 0 \rangle$  ( $i = x, y, z$ ) sont égaux entre eux.

**2.2.** On donne  $\langle r^2 \rangle = 3a_1^2$  pour l'état 1s. Évaluer la variation d'énergie de l'atome due à son interaction avec le miroir en utilisant la théorie des perturbations au premier ordre. On exprimera le résultat en fonction de  $E_I$ ,  $a_1$  et  $D_m$ .

**2.3.** Cette énergie correspond-elle à une interaction attractive ou répulsive ?

**2.4.** Evaluer l'accélération subie par un atome situé à 10 nanomètres de la surface. Comment se compare-t-elle à la pesanteur ?

**2.5.** Quelle est la limitation majeure du modèle fondé sur l'utilisation d'une image électrique instantanée de l'atome ? On pourra comparer le temps que met le champ électromagnétique pour se propager entre l'atome et le miroir, avec la période des radiations en jeu. On en déduira une distance typique caractérisant la limite de validité du modèle.

## 3 Force entre un atome excité et un atome dans son état fondamental

On considère deux atomes d'hydrogène, numérotés  $a$  et  $b$ , séparés par une distance  $D$  supposée grande devant le rayon de Bohr  $a_1$  (voir figure 1a). L'interaction entre ces atomes est obtenue en transposant au domaine quantique l'énergie (1), c'est-à-dire en remplaçant les composantes des dipôles  $d_{x_a}, d_{x_b}$ , etc., par les opérateurs correspondants  $\hat{d}_{x_a}, \hat{d}_{x_b}$ , etc.

La distance  $D$  est fixée à une valeur constante, sauf à la question 3.4.d. Pour simplifier, les atomes sont supposés discernables et on ne cherchera pas à appliquer le principe de Pauli. Une base des états possibles pour ce système à deux atomes est

$$|n_a, \ell_a, m_a\rangle \otimes |n_b, \ell_b, m_b\rangle \quad \text{qu'on peut aussi noter} \quad \psi_{n_a, \ell_a, m_a}(\vec{r}_a) \psi_{n_b, \ell_b, m_b}(\vec{r}_b) \quad (7)$$

On s'intéresse dans toute cette partie à la perturbation apportée par  $\hat{W}$  sur les niveaux d'énergie du système à deux atomes. Plus précisément, on considère la situation où l'énergie des deux atomes vaut  $-(5/4) E_I$ , correspondant à un atome dans son niveau fondamental  $n = 1$  (énergie  $-E_I$ ) et un atome sur son premier niveau excité  $n = 2$  (énergie  $-E_I/4$ ).

1. Précision concernant les images électriques (il n'est pas nécessaire de lire ce qui suit pour résoudre le problème) : dans cette méthode, on ajoute aux charges réelles leurs images miroirs par rapport à la surface réfléchissante, en inversant le signe des charges. Ceci donne comme expression pour le dipôle image  $d_{x_b} = -d_{x_a}$ ,  $d_{y_b} = -d_{y_a}$  et  $d_{z_b} = d_{z_a}$ . L'énergie d'interaction de l'atome face au miroir se déduit alors de (1) : la distance  $D$  est égale à  $2D_m$  et l'énergie d'interaction (qui peut être vue comme l'intégrale sur tout l'espace de la densité volumique d'énergie  $\epsilon_0 \mathcal{E}^2/2$ ) doit être divisée par 2 par rapport au résultat (1), car le champ électromagnétique n'existe que dans le demi-espace à l'extérieur du miroir.

**3.1.** En absence de  $\hat{W}$ , quelle est la dégénérescence totale  $N$  du niveau d'énergie  $-(5/4) E_I$ ? On tiendra compte des différentes valeurs de  $\ell$  et  $m$  possibles, ainsi que des deux configurations ( $a$  : excité,  $b$  : fondamental) et ( $a$  : fondamental,  $b$  : excité).

**3.2.** En principe, l'effet de  $\hat{W}$  au premier ordre est obtenu en diagonalisant la restriction de  $\hat{W}$  au sous-espace trouvé à la question précédente (matrice  $N \times N$ ). Les résultats de la première partie vont simplifier considérablement le travail. Pour un élément de matrice général du type

$$\langle n'_a, \ell'_a, m'_a | \otimes \langle n'_b, \ell'_b, m'_b | \hat{W} | n_a, \ell_a, m_a \rangle \otimes | n_b, \ell_b, m_b \rangle, \quad (8)$$

expliquer sans calcul pourquoi le résultat est nul si  $n_a = n'_a = 1$  (ou  $n_b = n'_b = 1$ ).

**3.3.** *Interaction entre un atome dans l'état fondamental 1s et un atome dans l'état excité 2s.*

- (a) Expliquer pourquoi l'élément de matrice (8) est nul si  $n'_a = 1$  et  $n_a = 2, \ell_a = 0$ .
- (b) Dédire de ce qui précède qu'il n'y a pas d'interaction à l'ordre 1 en  $W$  entre un atome dans l'état 1s et un atome dans l'état 2s.

**3.4.** *Interaction entre un atome dans l'état fondamental 1s et un atome dans l'état excité 2p.*

- (a) On considère l'état  $|n_a, \ell_a, m_a\rangle \otimes |n_b, \ell_b, m_b\rangle = |1, 0, 0\rangle \otimes |2, 1, 0\rangle$ . En utilisant les résultats de la partie 1, montrer qu'il y a un unique état  $\langle n'_a, \ell'_a, m'_a | \otimes \langle n'_b, \ell'_b, m'_b |$  conduisant à un élément de matrice (8) non nul.
- (b) Dédire de ce qui précède que l'étude de  $\hat{W}$  quand l'atome excité est préparé dans l'état  $n = 2, \ell = 1, m = 0$  se ramène à la diagonalisation d'une matrice  $2 \times 2$ . Trouver les valeurs propres de cette matrice en fonction de  $C, E_I, a_1$  et  $D$ .
- (c) Discuter la nature (attractive ou répulsive) de l'interaction en fonction de l'état interne des atomes.
- (d) On prépare la paire d'atomes dans l'état  $|1, 0, 0\rangle \otimes |2, 1, 0\rangle$ . Les états des centres de masse des atomes sont des paquet d'ondes centrés respectivement en  $\vec{R}_a$  et en  $\vec{R}_b$ , avec une extension spatiale petite devant  $D$ . Décrire de manière qualitative et sans calcul l'évolution du système. On se limitera à des durées suffisamment courtes pour que la distance  $D$  entre atomes change relativement peu.
- (e) Pour des distances équivalentes, comparer la force typique entre les deux atomes à celle exercée par le miroir de la partie 2.
- (f) En utilisant les résultats de la première partie, expliquer brièvement comment traiter le cas où l'atome excité est préparé dans un des deux états  $n = 2, \ell = 1, m = \pm 1$ . Indiquer comment les résultats obtenus ci-dessus pour l'état  $n = 2, \ell = 1, m = 0$  sont modifiés.

# Corrigé

## Exercice : particules identiques piégées

1. (a) Si les particules sont de spin 0 (bosons), l'état fondamental du système est obtenu en disposant chacune des  $N$  particules dans l'état fondamental  $n = 1$  du puits (figure 2a). L'énergie d'excitation correspond à l'énergie pour provoquer la transition  $n = 1 \rightarrow n = 2$ , c'est-à-dire  $3E_1$ . C'est donc compatible avec la valeur mesurée. Notons que le résultat  $E_{\text{ex}} = 3E_1$  ne dépend pas de la valeur de  $N$ .
  - (b) Si les particules ont un spin  $1/2$  (fermions), l'état fondamental est obtenu en mettant deux particules sur le niveau  $n = 1$ , deux particules sur  $n = 2$ , et une particule sur le niveau  $n = 3$  (figure 2b), puis en prenant le déterminant de Slater correspondant. L'énergie d'excitation correspond à l'énergie pour provoquer la transition  $n = 2 \rightarrow n = 3$ , c'est-à-dire  $5E_1$ . C'est donc incompatible avec la valeur mesurée.
  - (c) Pour un spin 1 (et tous les spins entiers), les particules sont des bosons et le résultat est identique à celui de la question (a).
  - (d) Pour un spin  $3/2$  (fermions), on peut mettre 4 particules sur le niveau  $n = 1$ , en tirant parti des 4 états de spin indépendants  $m = -3/2, m = -1/2, m = 1/2$  et  $m = 3/2$  (figure 2c). La cinquième particule est placée sur le niveau  $n = 2$ . Le vecteur d'état est obtenu en prenant le déterminant de Slater correspondant. L'énergie d'excitation vaut alors  $3E_1$ , ce qui est compatible avec la valeur mesurée. Notons que ce résultat restera vrai pour toute valeur de spin demi-entière, supérieure à  $3/2$ .
2. Puisque l'énergie d'excitation a changé quand on a changé le nombre de particules, les valeurs entières du spin sont exclues.
    - Si le spin  $s$  vaut  $3/2$ , les 10 particules se répartissent en quatre particules sur  $n = 1$ , quatre particules sur  $n = 2$  et deux particules sur  $n = 3$  (figure 2d). L'énergie d'excitation devient alors  $5E_1$ , ce qui correspond au résultat expérimental.
    - Si le spin est demi-entier et strictement supérieur à  $3/2$ , on peut mettre au moins 6 particules sur le niveau  $n = 1$ , et le niveau  $n = 2$  n'est alors pas plein. L'énergie d'excitation reste égale à  $3E_1$ , ce qui n'est pas la valeur mesurée.
 En conclusion, seule la valeur  $s = 3/2$  est compatible avec les deux résultats de mesure.

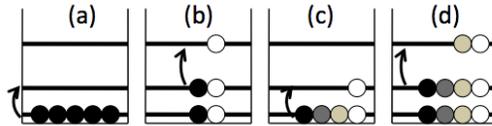


FIGURE 2 – (a-b-c) : Etat fondamental à 5 particules pour  $s = 0$ ,  $s = 1/2$  et  $s = 3/2$ . (d) Etat fondamental à 10 particules pour  $s = 3/2$ .

## Problème : interaction à longue portée entre atomes

### 1 L'opérateur dipôle électrique et ses éléments de matrice

**1.1.** L'état fondamental  $n = 1$  correspond à  $\ell = 0$  et donc  $m = 0$  (état  $1s$ ). Le premier niveau excité peut se décomposer en un sous-espace de  $\ell = m = 0$  (état  $2s$ ), et un sous-espace de  $\ell = 1$ , avec trois valeurs possibles de  $m$  :  $m = -1, 0, +1$  (niveau  $2p$ ).

**1.2.**  $(\hat{P}\hat{r}\hat{P}) \psi(\vec{r}) = (\hat{P}\hat{r}) \psi(-\vec{r}) = \hat{P}(\vec{r}\psi(-\vec{r})) = (-\vec{r})\psi(\vec{r})$ , c'est-à-dire  $\hat{P}\hat{r}\hat{P} = -\hat{r}$ .

**1.3.** On multiplie la relation  $\hat{P}\hat{r}\hat{P} = -\hat{r}$  à gauche par le bra  $\langle n', \ell', m' |$  et à droite par le ket  $|n, \ell, m\rangle$  :

$$\langle n', \ell', m' | \hat{P}\hat{r}\hat{P} |n, \ell, m\rangle = (-1)^{\ell'} (-1)^\ell \langle n', \ell', m' | \hat{r} |n, \ell, m\rangle = -\langle n', \ell', m' | \hat{r} |n, \ell, m\rangle, \quad (1)$$

ce qui montre que l'élément de matrice est nul si  $(-1)^{\ell'+\ell} = 1$ , c'est-à-dire si  $\ell + \ell'$  est pair. C'est en particulier le cas de l'élément de matrice du dipôle électrique entre l'état 1s et l'état 2s.

**1.4. (a)** On s'intéresse à  $d_z = q_e r \cos \theta$  qui est indépendant de  $\varphi$ . Dans l'élément de matrice à évaluer, les seuls terme dépendant de  $\varphi$  sont donc les harmoniques sphériques  $Y_{\ell, m} \propto e^{im\varphi}$  et  $Y_{\ell', m'}^* \propto e^{-im'\varphi}$ . Après intégration sur  $\varphi$  entre 0 et  $2\pi$ , le résultat est non nul seulement si  $m = m'$ , ce qui dans le cas présent ( $m' = 0$ ) impose  $m = 0$ .

**(b)** L'opérateur  $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$  commute avec l'opérateur  $\hat{d}_z = q_e \hat{z}$ . En prenant l'élément de matrice de  $[\hat{L}_z, \hat{d}_z] = 0$  entre  $\langle 1, 0, 0 |$  et  $|2, 1, m\rangle$ , on trouve  $\hbar(0 - m)\langle 1, 0, 0 | \hat{d}_z |2, 1, m\rangle = 0$ , ce qui entraîne que l'élément de matrice  $\langle 1, 0, 0 | \hat{d}_z |2, 1, m\rangle$  est nul si  $m \neq 0$ .

**(c)** L'élément de matrice s'écrit sous forme d'une intégrale en coordonnées sphériques :

$$\langle 1, 0, 0 | \hat{d}_z |2, 1, m\rangle = q_e \int R_{1,0}(r) R_{2,1}(r) r^3 dr \int Y_{0,0}^*(\theta, \varphi) Y_{1,0}(\theta, \varphi) \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (2)$$

L'intégrale radiale donne  $Ca_1$  et l'intégrale angulaire donne  $1/\sqrt{3}$ , soit finalement

$$\langle 1, 0, 0 | \hat{d}_z |2, 1, m\rangle = \delta_{m,0} q_e Ca_1 / \sqrt{3}. \quad (3)$$

**1.5. (a)** Les états  $|2, 1, 1\rangle$ ,  $|2, 1, 0\rangle$ ,  $|2, 1, -1\rangle$  forment une base orthonormée du sous-niveau 2p qui est de dimension 3. Les états proposés par l'énoncé correspondent à un changement de base dans ce sous-espace de dimension 3. Il est immédiat de vérifier que ces nouveaux états sont bien normés et orthogonaux entre eux. Les fonctions d'onde correspondantes s'écrivent

$$\chi_{2px}(\vec{r}) = \frac{x}{r} F(r) \quad \chi_{2py}(\vec{r}) = \frac{y}{r} F(r) \quad \chi_{2pz}(\vec{r}) = \frac{z}{r} F(r) \quad \text{avec } F(r) = R_{2,1}(r) \sqrt{3/4\pi}. \quad (4)$$

Cette base fait donc jouer des rôles équivalents aux trois axes de coordonnées  $x, y, z$ , contrairement à la base  $\psi_{n,\ell,m}$  qui privilégie l'axe  $z$ .

**(b)** L'action de  $\hat{L}_x$  sur  $|\chi_{2px}\rangle$  se calcule simplement :

$$\hat{L}_x |\chi_{2px}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-) (|2, 1, -1\rangle - |2, 1, 1\rangle) = \frac{1}{2\sqrt{2}} (\hat{L}_+ |2, 1, -1\rangle - \hat{L}_- |2, 1, 1\rangle) = 0, \quad (5)$$

où le dernier résultat est obtenu grâce à  $\hat{L}_+ |2, 1, -1\rangle = \hat{L}_- |2, 1, 1\rangle = \hbar \sqrt{2} |2, 1, 0\rangle$ . Notons que ce résultat aurait pu se déduire directement de la symétrie notée plus haut de la base  $\{\chi_{2px}, \chi_{2py}, \chi_{2pz}\}$  vis-à-vis des trois axes  $x, y, z$  et du fait que  $\hat{L}_z |\chi_{2pz}\rangle = 0$ .

**(c)** On peut calculer de manière identique  $\hat{L}_y |\chi_{2py}\rangle$  ou utiliser la symétrie de la base  $\{\chi_{2px}, \chi_{2py}, \chi_{2pz}\}$  vis-à-vis des trois axes  $x, y, z$ .

**(d)** Puisque la base proposée fait jouer des rôles équivalents aux trois axes de l'espace, le résultat trouvé plus haut pour  $\hat{d}_z$  s'écrit généralement  $\langle 1, 0, 0 | \hat{d}_i | \chi_{2pj} \rangle = \delta_{i,j} q_e Ca_1 / \sqrt{3}$  avec  $i, j = x, y, z$ .

## 2 L'atome face à son miroir

**2.1.** L'état  $s$  est un état à symétrie sphérique, d'où l'égalité des valeurs moyennes de  $d_i^2$ , avec  $i = x, y, z$  :  $\langle 1, 0, 0 | \hat{d}_i^2 | 1, 0, 0 \rangle = (q_e^2/3) \langle 1, 0, 0 | \hat{r}^2 | 1, 0, 0 \rangle$ .

**2.2.** L'état 1s étant non dégénéré (on néglige ici tout effet lié au spin), la variation d'énergie de l'état fondamental est donnée par  $\Delta E = \langle 1, 0, 0 | \hat{W} | 1, 0, 0 \rangle$ , ce qui vaut :

$$\Delta E = -\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{16D_m^3} 4a_1^2 = -\frac{E_I}{2} \left( \frac{a_1}{D_m} \right)^3. \quad (6)$$

**2.3.** L'énergie décroît quand l'atome s'approche du miroir, l'atome est donc attiré par ce miroir.

**2.4.** La force vaut  $F = -d(\Delta E)/dD_m$  et l'accélération vaut  $a = F/m_p$ , c'est-à-dire :

$$|a| = \frac{3}{2} \frac{E_I}{m_p} \frac{a_1^3}{D_m^4}, \quad (7)$$

ce qui correspond à  $|a| = 3 \cdot 10^{10} \text{m/s}^2$  pour une distance de 10 nm, valeur considérablement plus grande que l'accélération de la pesanteur ( $9.8 \text{m/s}^2$ ).

**2.5.** L'utilisation d'une image électrique instantanée est valable dans le cas d'un dipôle statique ou oscillant lentement dans le temps. Or, le dipôle atomique moyen dans l'état 1s est nul et la valeur moyenne non nulle de son carré provient du fait que ce dipôle est une quantité fluctuante, oscillant aux différentes fréquences de Bohr de l'atome  $(E_I - E_I/n^2)/h$ . Une manière parlante de montrer la contribution des différents états  $n$  est de ré-écrire la valeur moyenne du carré du dipole sous la forme :

$$\langle 1, 0, 0 | \hat{d}_i^2 | 1, 0, 0 \rangle = \sum_{(n, \ell, m) \neq (1, 0, 0)} \langle 1, 0, 0 | \hat{d}_i | n, \ell, m \rangle \langle n, \ell, m | \hat{d}_i | 1, 0, 0 \rangle \quad (8)$$

en utilisant la relation de fermeture. À partir d'une écriture de ce type, on comprend qualitativement (même si la notion d'opérateur dépendant du temps n'est pas au programme de cette composition) que la fonction de corrélation en temps du dipole  $\langle 1, 0, 0 | \hat{d}_i(t) \hat{d}_i(0) | 1, 0, 0 \rangle$  fera intervenir les fréquences de Bohr mentionnées plus haut.

Prenons comme référence la fréquence de Bohr entre l'état 1s et l'état 2p. L'énergie correspondante est 10.2 eV, ce qui correspond à une longueur d'onde  $\lambda = 0.12 \mu\text{m}$ . Les phénomènes de propagation des ondes électromagnétiques entre l'atome et le miroir font intervenir des facteurs variant comme  $e^{ikD_m}$  avec  $k = 2\pi/\lambda$ . Pour que l'utilisation d'une image électrique instantanée soit possible, il faut que les effets de retards liés à ces termes de propagation soient petits, ce qui impose  $kD_m \ll 1$ , ou encore  $D_m \ll \lambda/(2\pi) = 20 \text{nm}$ . La valeur choisie pour l'application numérique précédente,  $D_m = 10 \text{nm}$ , se situe à la limite supérieure de validité de cette approche.

### 3 Force entre un atome excité et un atome dans son état fondamental

**3.1.** Pour un atome unique, l'état interne 1s n'est pas dégénéré et le niveau  $n = 2$  est dégénéré 4 fois. La dégénérescence totale du niveau d'énergie  $-(5/4)E_I$  est donc 8, une base de ce niveau étant  $\{|1, 0, 0\rangle \otimes |2, \ell, m\rangle, |2, \ell, m\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle\}$  avec  $\ell = m = 0$  ou  $\ell = 1, m = 0, \pm 1$ .

**3.2.** Lors de l'écriture de la matrice de  $\hat{W}$  dans la base indiquée ci-dessus, on voit apparaître deux types d'éléments de matrice : ceux pour lesquels les niveaux occupés par l'atome  $a$  et l'atome  $b$  sont les mêmes dans le bra et dans le ket ( $n_a = n'_a, n_b = n'_b$ ) et ceux pour lesquels ces niveaux s'inversent. Les éléments de matrice pour lesquels l'atome  $a$  est dans son état fondamental dans le bra et dans le ket donneront forcément un résultat nul. Ils font en effet intervenir  $\langle 1, 0, 0 | \hat{d}_{i_a} | 1, 0, 0 \rangle$  ( $i = x, y, z$ ) qui vaut 0 d'après les résultats de la partie 1. Il en va de même si c'est l'atome  $b$  qui est dans son état fondamental dans le bra et dans le ket. On voit donc d'emblée que la matrice  $8 \times 8$  est diagonale par blocs, avec quatre blocs  $4 \times 4$ , les deux blocs situés sur la diagonale étant nuls.

**3.3. (a)** L'élément de matrice correspondant à l'atome  $a$  dans l'état 2s fera intervenir  $\langle 1, 0, 0 | \hat{d}_{i_a} | 2, 0, 0 \rangle$  ( $i = x, y, z$ ), qui vaut 0 car les états 1s et 2s ont même parité (question 1.3).

**(b)** Dans la matrice  $8 \times 8$  évoquée ci-dessus, toutes les lignes ou les colonnes faisant intervenir l'atome  $a$  ou l'atome  $b$  dans l'état 2s seront donc nulles. Il n'y a donc pas de déplacements des niveaux d'énergie dus à  $\hat{W}$  dans le sous-espace engendré par  $\{|1, 0, 0\rangle \otimes |2, 0, 0\rangle, |2, 0, 0\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle\}$ , ce qui signifie physiquement qu'un atome dans l'état 1s et un atome dans l'état 2s n'interagissent pas entre eux (à cet ordre du calcul). Finalement, il reste une matrice  $6 \times 6$  à diagonaliser, correspondant aux vecteurs de base  $\{|1, 0, 0\rangle \otimes |2, 1, m\rangle, |2, 1, m\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle\}$ ,  $m = 0, \pm 1$ , cette matrice étant diagonale par bloc, avec quatre blocs  $3 \times 3$ , les deux blocs situés sur la diagonale étant nuls.

**3.4. (a)** On considère l'élément de matrice

$$\langle n'_a, \ell'_a, m'_a | \otimes \langle n'_b, \ell'_b, m'_b | \left( \hat{x}_a \hat{x}_b + \hat{y}_a \hat{y}_b - 2\hat{z}_a \hat{z}_b \right) | 1, 0, 0 \rangle \otimes | 2, 1, 0 \rangle .$$

Pour que cet élément de matrice soit non nul, il faut que le bra soit du type  $\langle 2, 1, m'_a | \otimes \langle 1, 0, 0 |$ . D'après les résultats de la partie 1, seul le terme  $-2z_a z_b$  va contribuer car  $\langle 1, 0, 0 | x_b | 2, 1, 0 \rangle$  et  $\langle 1, 0, 0 | y_b | 2, 1, 0 \rangle$  sont nuls. Il faut alors que  $\langle 2, 1, m'_a | z_a | 1, 0, 0 \rangle$  soit non nul, ce qui impose  $m'_a = 0$ .

(b) On peut donc dégager dans la matrice  $6 \times 6$  restante une sous-matrice  $2 \times 2$  correspondant au sous-espace engendré par

$$\{|1, 0, 0\rangle \otimes |2, 1, 0\rangle, |2, 1, 0\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle\}. \quad (9)$$

Ces deux états ne sont couplés à aucun autre état de la base considérée ici. Les coefficients diagonaux de cette matrice  $2 \times 2$  sont nuls ; les coefficients en dehors de la diagonale sont égaux et valent

$$\frac{-2q_e^2}{4\pi\epsilon_0 D^3} |\langle 1, 0, 0 | \hat{z} | 2, 1, 0 \rangle|^2 = -\frac{4C^2}{3} E_I \left(\frac{a_1}{D}\right)^3 \quad (10)$$

Les valeurs propres de la matrice sont  $\pm(4C^2/3) E_I (a_1/D)^3$ .

(c) Les vecteurs propres correspondant aux deux valeurs propres que nous venons de trouver sont les combinaisons symétriques et antisymétriques des deux états (9). La combinaison symétrique  $(|1, 0, 0\rangle \otimes |2, 1, 0\rangle + |2, 1, 0\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle)/\sqrt{2}$  correspond à une attraction entre les deux atomes (énergie négative), et la combinaison antisymétrique à une répulsion (énergie positive).

(d) L'état initial  $|1, 0, 0\rangle \otimes |2, 1, 0\rangle$  est combinaison linéaire des deux états propres  $(|1, 0, 0\rangle \otimes |2, 1, 0\rangle \pm |2, 1, 0\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle)/\sqrt{2}$ , correspondant respectivement à une attraction et à une répulsion. L'état spatial de la paire d'atomes à un instant ultérieur sera une combinaison linéaire d'un état où les atomes se sont rapprochés l'un de l'autre (sous l'effet de la force attractive, pour l'état symétrique) et un état où les atomes se sont éloignés l'un de l'autre (sous l'effet de la force répulsive, pour l'état antisymétrique). Cette séparation des paquets d'ondes externes selon l'état interne occupé est similaire à celle qui se produit pour une particule de spin  $1/2$  dans l'expérience de Stern et Gerlach, pour un état de spin  $(|+\rangle_z + |-\rangle_z)/\sqrt{2}$ , l'aimant étant orienté selon  $Oz$ . Il faut se limiter ici à des temps assez courts, pour que les atomes n'aient pas le temps de venir au contact l'un de l'autre, ni de retomber sur l'état électronique fondamental par émission spontanée d'un photon.

(e) Pour  $D = 2D_m$ , le module de la force trouvée ici est du même ordre que celle obtenue dans la partie 2 pour un atome face à un miroir puisque  $C \sim 1$ .

(f) L'utilisation de la base  $\{|\chi_{2pj}\rangle\}$ ,  $j = x, y, z$  au lieu de la base  $\{|2, 1, m\rangle\}$ ,  $m = 0, \pm 1$ , permet de répondre sans calcul à cette question. La seule différence entre le cas de l'état  $|2, 1, 0\rangle = |\chi_{2pz}\rangle$  considéré plus haut et le cas des états  $|\chi_{2px}\rangle$  et  $|\chi_{2py}\rangle$  est le coefficient  $-2$  de  $z_a z_b$  qui est remplacé par le coefficient  $+1$  devant  $x_a x_b$  et  $y_a y_b$ . Les énergies d'interaction sont donc deux fois plus petites et les rôles des combinaisons symétriques et antisymétriques des vecteurs de base sont inversés. Les combinaisons symétriques  $(|1, 0, 0\rangle \otimes |\chi_{2pj}\rangle + |\chi_{2pj}\rangle \otimes |1, 0, 0\rangle)/\sqrt{2}$  ( $j = x, y$ ) correspondent à une répulsion entre les deux atomes, et les combinaisons antisymétriques à une attraction, les énergies correspondantes étant  $\pm(2C^2/3) E_I (a_1/D)^3$ .

**Pour en savoir plus :** A. Aspect and J. Dalibard, Poincaré Seminar 2002, p. 93-108 (Birkhäuser Verlag, Basel, 2003) : Measurement of the atom-wall interaction : from London to Casimir-Polder.  
[http://www.phys.ens.fr/~dalibard/publications/casimir\\_polder.pdf](http://www.phys.ens.fr/~dalibard/publications/casimir_polder.pdf)