

Mécanique quantique – L2

TD 10 : Perturbations

Adrien Mahé – Sylvain Nascimbène

http://www.phys.ens.fr/~nascimbene/td/td_index.html

1 Forces de Van der Waals

Cet exercice étudie l'interaction entre atomes neutres à grande distance. A courte distance les fonctions d'onde électroniques se recouvrent et les électrons peuvent facilement passer d'un noyau à l'autre, ce qui abaisse fortement l'énergie. On parle alors d'interaction covalente. A grande distance, le recouvrement des fonctions d'onde décroît exponentiellement et l'interaction est dominée par l'interaction électrostatique entre les moments dipolaires électriques des atomes. On considère deux atomes d'hydrogène dans leur état fondamental 1s (noté $|\phi_0\rangle$), distants de $R \gg a_0$, a_0 étant le rayon de Bohr. On note $\mathbf{R} = R\mathbf{e}_z$ le vecteur joignant les deux protons, et $\mathbf{r}_{1,2}$ les vecteurs reliant l'électron au proton pour chaque atome. Chaque atome possède un dipole électrique $\mathbf{d}_{1,2} = -e\mathbf{r}_{1,2}$, où $-e$ est la charge de l'électron.

1. On rappelle qu'en physique classique l'énergie d'interaction entre les deux dipôles s'écrit

$$W = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 R^3} [\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2 - 3(\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{e}_z)(\mathbf{d}_2 \cdot \mathbf{e}_z)].$$

Ecrire le hamiltonien d'interaction à l'aide des opérateurs $x_{1,2}$, $y_{1,2}$ et $z_{1,2}$.

2. Combien vaut l'énergie d'interaction au premier ordre de la théorie des perturbations ?
3. On note $|\phi_\alpha\rangle$ les états excités de l'atome d'hydrogène. Montrer que le terme du second ordre s'écrit

$$E = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \frac{|\langle \phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_2} | W | \phi_{01} \phi_{02} \rangle|^2}{-2R_\infty - E_{\alpha_1} - E_{\alpha_2}},$$

où R_∞ est la constante de Rydberg.

4. Justifier qu'il est raisonnable de négliger les termes en E_{α_i} pour évaluer E .
5. En déduire l'expression suivante de l'énergie d'interaction de Van der Waals :

$$E(R) = -6 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{a_0^5}{R^6}.$$

On donne l'intégrale suivante :

$$\int d^3r |\phi_0(r)|^2 r^2 = 3a_0^2.$$

2 Pertes d'énergie d'une particule dans la matière

On cherche à décrire les pertes d'énergie d'une particule chargée de masse m et de charge q pénétrant avec une énergie E dans un milieu matériel.

On considère l'interaction de la particule avec un atome unique. On supposera la vitesse v de la particule incidente suffisamment rapide pour que sa trajectoire soit peu modifiée par l'interaction avec un seul atome. Pour simplifier, on considère un atome infiniment lourd.

Dans la suite on choisira l'origine des coordonnées au centre de l'atome et la particule chargée sera repérée par $\mathbf{r}(t)$.

1. (a) Écrire l'énergie $\hat{V}(t)$ de l'atome due au passage de la particule chargée.
- (b) On suppose que le paramètre d'impact b est beaucoup plus grand que la taille de l'atome. En déduire que $\hat{V}$ se met sous la forme

$$\hat{V}(t) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r(t)^3} \mathbf{r}(t) \cdot \hat{\mathbf{D}},$$

où $\hat{\mathbf{D}}$ est l'opérateur moment dipolaire de l'atome.

2. On suppose que à $t = -\infty$ l'atome est dans son état fondamental $|i\rangle$, d'énergie E_i .
 - (a) Montrer que $\hat{V}$ peut être traité en perturbation du hamiltonien $\hat{H}_0$ de l'atome seul.
 - (b) Soient $|f\rangle$ les états excités de H_0 . On note c_f la projection de l'état de l'atome sur $|f\rangle$. Quelle équation différentielle régit $b_f(t) = e^{i\frac{E_f t}{\hbar}} c_f(t)$? Donner la solution pour $b_f(t)$ au premier ordre sous la forme d'une intégrale sur le temps.
 - (c) Quelle est l'expression de l'énergie δE_a gagnée par l'atome aux temps longs? Donner une définition du temps d'interaction τ . Que vaut δE_a dans le cas où τ est grand? Interpréter.
 - (d) On se place dans le cas d'un temps d'interaction court. Montrer qu'alors δE_a s'écrit

$$\delta E_a = \frac{4q^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 b^2 v^2} \sum_f (E_f - E_i) |\langle i | \hat{\mathbf{D}}_x | f \rangle|^2.$$

On rappelle

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1+x^2)^{3/2}} dx = 2$$

3. Règle de Thomas-Reiche-Kuhn.

On suppose que le hamiltonien non perturbé se met sous la forme $\hat{H}_0 = \sum_k \hat{p}_k^2 / 2m_e + \hat{U}(\hat{\mathbf{r}}_k)$, où $\hat{\mathbf{p}}_k$ et $\hat{\mathbf{r}}_k$ sont les impulsions et les positions des électrons de l'atome diffuseur et m_e , $-e$ sont la masse et la charge d'un électron. On va alors montrer que la somme obtenue dans la question 2.d) prend une forme très simple.

- (a) Montrer que $\hat{\Pi}$ défini par

$$\hat{\Pi} = \frac{1}{-Ze} \sum_k \hat{\mathbf{p}}_k$$

est le moment conjugué de $\hat{\mathbf{D}}$. Dans cette expression, Z est le numéro atomique du diffuseur.

- (b) Calculer $[\hat{\mathbf{D}}, \hat{H}_0]$. En déduire que

$$i\hbar \frac{Ze^2}{m_e} \langle e | \hat{\mathbf{\Pi}} | f \rangle = (E_f - E_e) \langle e | \hat{\mathbf{D}} | f \rangle,$$

$|e\rangle$ et $|f\rangle$ étant deux états stationnaires quelconques.

- (c) En introduisant la relation de fermeture dans 3.a) et en utilisant 3.b), montrer pour finir que

$$\frac{2m_e}{Ze^2\hbar^2} \sum_e (E_e - E_f) |\langle e | \hat{\mathbf{D}}_x | f \rangle|^2 = 1.$$

4. En utilisant les questions précédentes, donner l'expression de la perte d'énergie δE de la particule incidente.