

---

## Correction de l'épreuve C

---

Dans ce corrigé, les équations sont numérotées séquentiellement avec celles de l'énoncé.

### A Introduction

#### A.I Généralités sur le mouvement

- 1 On a :  $\vec{f} = -\text{grad } U = -K/r^2 \vec{u}_r$ .
- 2 On a :  $\vec{p} = m\vec{v}$ .
- 3 Une trajectoire *bornée* possède une valeur maximale du rayon,  $r_{\max}$  pour laquelle l'énergie cinétique s'annule. Donc  $E = E_p(r_{\max}) = U(r_{\max}) < 0$ .
- 4 On a  $d\vec{L}/dt = \vec{v} \wedge \vec{p} + \vec{r} \wedge \vec{f}$ , et les deux produits vectoriels sont nuls en vertu des questions 1) et 2).
- 5 La conservation de  $\vec{L}$  se traduit par la *planéité* de la trajectoire ( $\vec{r}$  et  $\vec{p}$  restent dans le plan normal à  $\vec{L}$ ), et par la loi des aires : la vitesse aréolaire est constante ( $\omega = \dot{\varphi}$  étant la vitesse angulaire) :

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2} r^2 \omega = \frac{L}{2m} . \quad (\text{A.3})$$

- 6 Pour le potentiel central de Kepler-Coulomb, les trajectoires sont des coniques. Lorsque l'énergie est négative, on a affaire à des ellipses.
- 7 Montrons tout d'abord le *lemme*, pour  $G$  grandeur bornée :

$$\left\langle \frac{dG}{dt} \right\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \frac{dG}{dt} dt = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{[G]_0^\tau}{\tau} = 0 , \quad \text{puisque } [G]_0^\tau \text{ est borné. } \square \quad (\text{A.4})$$

Le viriel  $\mathcal{V} = \vec{r} \cdot \vec{p}$  est une quantité bornée, puisque  $p \rightarrow 0$  pour  $r \rightarrow r_{\max}$ , et que si  $r \rightarrow 0$ ,  $p \sim r^{-1/2}$  et donc  $rp \sim r^{1/2} \rightarrow 0$ . On a donc :

$$\langle d\mathcal{V}/dt \rangle = 0 = \langle \vec{v} \cdot \vec{p} + \vec{r} \cdot \vec{f} \rangle = 2\langle E_c \rangle + \langle E_p \rangle \Rightarrow E = -\langle E_c \rangle = \langle E_p \rangle / 2 . \quad (\text{A.5})$$

- 8 De ce qui précède, et de la RFD  $mr\omega^2 = K/r^2$  on tire :

$$r = K/(-2E) , \quad \omega = (K/mr^3)^{1/2} = ((-2E)^3/mK^2)^{1/2} \text{ et } L = (-2Emr^2)^{1/2} = (mK^2/(-2E))^{1/2} \quad (\text{A.6})$$

#### A.II Modèle de Bohr

- 1 Lorsqu'une charge effectue un mouvement classique de rotation circulaire uniforme, on a deux dipôles oscillant à la fréquence  $\omega$ , et il y a donc émission d'un rayonnement électromagnétique à cette fréquence.
- 2 L'hypothèse de Bohr s'écrit  $E(n) - E(n-1) = \hbar\omega(n)$ , soit pour  $n$  grand :

$$\frac{dE}{dn} \underbrace{dn}_{=-1} = \hbar\omega = \hbar \left( \frac{(-2E)^3}{mK^2} \right)^{1/2}$$

et donc :

$$\frac{d(-E)}{(-E)^{3/2}} = \left( \frac{8\hbar^2}{mK^2} \right)^{1/2} dn \Rightarrow 2(-E)^{-1/2} = \left( \frac{8\hbar^2}{mK^2} \right)^{1/2} (n + n_0) \Rightarrow E(n) = -\frac{mK^2}{2\hbar^2} \frac{1}{(n + n_0)^2} , \quad (\text{A.7})$$

où  $n_0$  est une constante d'intégration.

- 3 La formule de Rydberg s'écrit encore :

$$E(n') - E(n) = \hbar\omega_{n,n'} = 2\pi\hbar c\mathcal{R} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$$

qui est compatible avec le résultat de la question précédente à condition de prendre  $n_0 = 0$ , et de fixer la constante de Rydberg comme suit :

$$\mathcal{R} = \frac{mK^2}{4\pi c\hbar^3} \approx 1,097 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} , \quad (\text{A.8})$$

qui est effectivement proche de la valeur expérimentale.

- 4 En reprenant les relations (A.6), on vérifie que  $r \propto 1/E$ ,  $v \propto E_c^{1/2} \propto (-E)^{1/2}$ ,  $\omega \propto (-E)^{-3/2}$  et  $L \propto (-E)^{-1/2}$ , ce qui donne bien les dépendances en  $n$  demandées, moyennant l'expression finale des niveaux d'énergie :

$$E(n) = -\frac{mK^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad (\text{A.9})$$

et on obtient :

$$a_0 = \hbar^2/mK, \quad E_0 = mK^2/\hbar^2, \quad v_0 = K/\hbar, \quad \omega_0 = mK^2/\hbar^3, \quad L_0 = \hbar. \quad (\text{A.10})$$

On note que ces constantes sont les valeurs réalisées sur l'orbite de Bohr de  $n = 1$  à l'exception de l'énergie  $E_0 = -2E_1$ .

- 5 a) Dans le système considéré,  $K = a_0 E_0$  a la valeur numérique 1, et le choix  $e = 1$  unité de charge impose à la constante  $4\pi\epsilon_0$  la valeur numérique 1. L'unité de champ électrique s'écrit alors :

$$F_0 = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 a_0^2} = \frac{m^2 K^3}{e\hbar^4} \approx 5,14 \times 10^{11} \text{ V} \cdot \text{m}^{-1}, \quad (\text{A.11})$$

qui est aussi la valeur (colossale) du champ coulombien sur la première orbite de Bohr. L'unité de champ magnétique s'obtient, via la force de Lorentz, en écrivant :

$$B_0 = \frac{F_0}{v_0} = \frac{m^2 K^2}{e\hbar^3} \approx 2,35 \times 10^5 \text{ T} \quad (\text{A.12})$$

b) La valeur numérique de  $c$  dans le système d'unités atomique est par définition la valeur numérique du nombre sans dimension  $c/v_0 = \hbar c/K = 1/\alpha \approx 137$ . Comme on doit toujours avoir la relation  $c^{-2} = \epsilon_0 \mu_0$ , on en déduit que dans le système d'unités atomiques, la valeur numérique de  $\mu_0$  est  $\alpha^2$ .

*Nota* : Le champ magnétique créé par l'électron sur le noyau est donc environ  $10^4$  fois inférieur à l'unité de champ  $B_0$ .

## B La symétrie additionnelle du problème de Kepler-Coulomb

### B.I Vecteur de Laplace

- 1 Le vecteur rotation instantané de la base locale liée à l'électron s'écrit  $\vec{\mathcal{Q}} = \vec{L}/mr^2$ , puisque le « moment d'inertie » de l'électron par rapport à l'origine est simplement  $mr^2$ . Le résultat demandé en découle.  
*Autre démonstration* : utilisant  $\vec{u}_r = \vec{r}/r$  et  $dr/dt = \vec{u}_r \cdot d\vec{r}/dt$  :

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{u}_r}{dt} &= \frac{1}{r} \frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{d}{dt} \frac{1}{r} \vec{r} \\ &= \frac{1}{r} \frac{\vec{p}}{m} + \left(-\frac{1}{r^2}\right) \vec{u}_r \cdot \frac{\vec{p}}{m} \vec{r} \\ &= \frac{1}{mr^3} (r^2 \vec{p} - \vec{r} \cdot \vec{p} \vec{r}) = \frac{(\vec{r} \wedge \vec{p}) \wedge \vec{r}}{mr^3}. \quad \square \end{aligned}$$

en reconnaissant le développement du double produit vectoriel  $(\vec{r} \wedge \vec{p}) \wedge \vec{r}$ .

- 2 Dans le résultat général précédent, on identifie la quantité  $\vec{u}_r/r^2$ . Dans le cas particulier qui nous intéresse, elle est proportionnelle à la force coulombienne. Il vient :

$$\frac{d\vec{u}_r}{dt} = \frac{\vec{L}}{m} \wedge \left( \frac{-1}{K} \frac{d\vec{p}}{dt} \right). \quad \square \quad (\text{B.11})$$

- 3 Le vecteur  $\vec{L}$  étant normal au plan de la trajectoire, on en déduit que  $\vec{L} \wedge \vec{p}$ , de même que  $\vec{u}_r$ , sont dans ce plan, et donc  $\vec{\mathcal{A}}$  aussi. Donc  $\vec{L} \cdot \vec{\mathcal{A}} = 0$ .
- 4 Le produit  $\vec{r} \cdot \vec{\mathcal{A}}$  est le produit de  $\vec{r}$  avec un vecteur constant, et peut donc s'écrire :  $\vec{\mathcal{A}} \cdot \vec{r} = r \mathcal{A} \cos(\varphi)$ , si l'origine de l'angle  $\varphi$  est choisie dans la direction de  $\vec{\mathcal{A}}$ . Par ailleurs, on peut évaluer :

$$\vec{\mathcal{A}} \cdot \vec{r} = \frac{1}{mK} (\vec{L} \wedge \vec{p}) \cdot \vec{r} + r = -\frac{L^2}{mK} + r,$$

où l'on a reconnu le produit mixte  $(\vec{L} \wedge \vec{p}) \cdot \vec{r} = \vec{L} \cdot (\vec{p} \wedge \vec{r}) = -\vec{L}^2$ .

On en déduit :

$$r(\varphi) = \frac{L^2/mK}{1 - \mathcal{A} \cos \varphi}. \quad (\text{B.12})$$

Il s'agit, comme attendu, de l'équation polaire d'une ellipse de paramètre  $P = L^2/mK$ , d'excentricité  $\mathcal{A}$ , dont le grand axe est dirigé parallèlement à  $\vec{\mathcal{A}}$ .

5 On a :

$$\vec{\mathcal{A}}^2 = \frac{(\vec{L} \wedge \vec{p})^2}{m^2 K^2} + 1 + 2 \frac{(\vec{L} \wedge \vec{p}) \cdot \vec{u}_r}{mK}$$

dont le premier terme est proportionnel à  $L^2 p^2$  puisque  $\vec{L} \cdot \vec{p} = 0$ , et le troisième fait à nouveau intervenir le produit mixte précédent, à  $1/r$  près. Il vient :

$$\mathcal{A}^2 = 1 + \frac{2L^2}{mK^2} \left( \frac{p^2}{2m} - \frac{K}{r} \right) \quad \text{soit} \quad E = -\frac{mK^2}{2L^2} (1 - \mathcal{A}^2) . \quad (\text{B.13})$$

Pour une ellipse, l'excentricité  $\mathcal{A}$  doit être de valeur absolue inférieure à 1 (pour que le dénominateur de (B.12) ne s'annule pas) , ce qui est visiblement équivalent à la condition  $E < 0$ .

6 Dans le cas d'une orbite circulaire, l'excentricité est nulle, et donc  $\vec{\mathcal{A}} = \vec{0}$ . Si au contraire c'est  $\vec{L}$  qui est nul,  $\vec{\mathcal{A}} = \vec{u}_r = cste$  et l'orbite est une ellipse dégénérée sur un segment de droite délimité par l'origine et un point situé à  $r = K/(-E)$ .

7 Les vecteurs  $\vec{L}$  et  $\vec{\mathcal{A}}$  fournissent *a priori* six constantes du mouvement, auxquelles s'ajoute l'énergie. Toutefois, la conditions  $\vec{L} \cdot \vec{\mathcal{A}} = 0$  et l'expression (B.13) introduisent 2 liaisons, ce qui réduit à  $7 - 2 = 5$  le nombre de constantes indépendantes. Ces 5 constantes caractérisent complètement la trajectoire, la seule constante d'intégration restant à déterminer est la position initiale de l'électron sur l'orbite elliptique.

8 Figure B.1 ci-dessous.

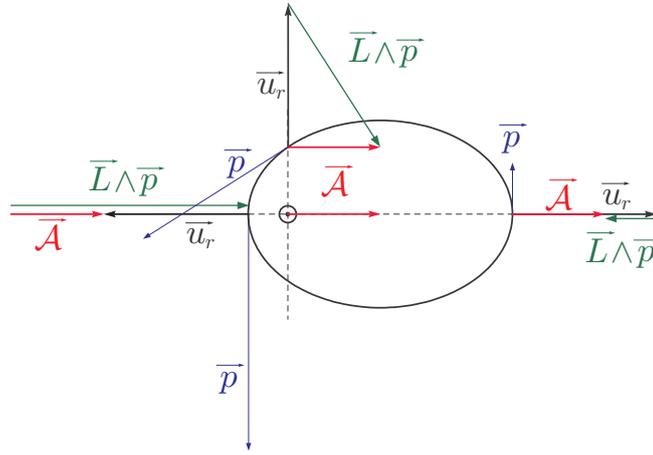


Fig. B.1 – Représentation d'une trajectoire et illustration de la conservation de  $\vec{\mathcal{A}}$  (avec des unités arbitraires, telles que  $\vec{L} \wedge \vec{p}$  ait la même longueur que  $\vec{p}$ ).

9 A partir de l'équation polaire (B.12), on détermine les positions radiales du péricentre et de l'apocentre :

$$r_P = \frac{L^2/mK}{1 + \mathcal{A}} \quad (\varphi_P = \pi) \quad , \quad r_A = \frac{L^2/mK}{1 - \mathcal{A}} \quad (\varphi_A = 0) \quad ,$$

d'où le demi grand-axe :

$$a = \frac{1}{2}(r_A + r_P) = \frac{L^2}{mK(1 - \mathcal{A}^2)} \quad , \quad (\text{B.14})$$

et le demi petit axe s'en déduit par la multiplication par  $(1 - \mathcal{A}^2)^{1/2}$  :

$$b = \frac{L^2}{mK\sqrt{1 - \mathcal{A}^2}} \quad . \quad (\text{B.15})$$

En utilisant la formule (B.13), on constate que  $E = -K/2a$ , c'est à dire qu'elle ne dépend de  $L$  et de  $\mathcal{A}$  que par la combinaison particulière donnant  $a$ , indépendamment des valeurs individuelles de  $L$  et de  $\mathcal{A}$ . Ainsi, deux orbites de même grand axe ont la même énergie, quelque soit la valeur du petit axe.

10 Au lieu d'appliquer la loi des aires (A.3) de façon différentielle, on peut l'écrire pour une révolution complète :

$$\frac{\pi a b}{T} = \frac{L}{2m} \quad \Rightarrow \quad T = \frac{2\pi}{mK^2} \frac{L^3}{(1 - \mathcal{A}^2)^{3/2}} = \frac{2\pi}{mK^2} \left( \frac{-2E}{mK^2} \right)^{-3/2} = 2\pi \left( \frac{mK^2}{(-2E)^2} \right)^{1/2} \quad , \quad (\text{B.16})$$

qui dépend donc seulement de  $E$  et non des valeurs particulières de  $L$  et  $A$ .

11 Il suffit de remplacer  $E$  par son expression en fonction de  $a$  :

$$T = \frac{2\pi}{mK^2} \left( \frac{K/a}{mK^2} \right)^{-3/2} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{K}} a^{3/2}, \quad (\text{B.17})$$

et on retrouve la troisième loi de Kepler  $T^2 = m/K a^3/T^2 = K/4\pi^2 m$ .

12 En utilisant la valeur de  $a$  et sa relation avec  $E$ , il vient :

$$I = \frac{L}{\sqrt{1-\mathcal{A}^2}} \quad \text{soit aussi} \quad \mathcal{A}^2 = 1 - \frac{L^2}{I^2}. \quad (\text{B.18})$$

13 De  $E = -mK^2/2I^2$  on déduit

$$\frac{dE(I)}{dI} = \frac{mK^2}{I^3} = \frac{-2E}{I} = \left( \frac{(-2E)^3}{mK^2} \right)^{1/2}, \quad (\text{B.19})$$

qui est bien la valeur de  $\omega$  obtenue pour l'orbite circulaire (A.6), mais aussi dans le cas général (B.16).

Le lien entre l'énergie et la période ne dépendant pas de l'excentricité, on doit aussi avoir  $E = -E_0/2n^2 = -mK^2/2I^2$  pour toutes les orbites, et donc  $I = n\hbar$ , indépendamment des valeurs particulières de  $L$  et  $\mathcal{A}$ .

## B.II Valeur moyenne de $\vec{r}$ et des puissances de $r$

1 En vertu du lemme (A.4),  $\langle \vec{p} \rangle \propto \langle d\vec{r}/dt \rangle = 0$ , et donc

$$\vec{\mathcal{A}} = \langle \vec{\mathcal{A}} \rangle = \vec{L} \wedge \langle \vec{p} \rangle / mK + \langle \vec{u}_r \rangle = \langle \vec{u}_r \rangle.$$

Si on développe le double produit vectoriel dans  $\vec{\mathcal{A}} = \langle \vec{\mathcal{A}} \rangle$ , on obtient  $\langle \vec{r} \cdot \vec{p} \vec{p} \rangle = \langle p^2 \vec{r} \rangle$ .

2 On a vu précédemment (cf. question 8) que  $\vec{\mathcal{A}}$  était dirigé selon le grand axe de l'ellipse, qui est un axe de symétrie de l'orbite. En outre, l'électron passe très vite au voisinage du péricentre où  $r$  est faible, et très lentement au voisinage de l'apocentre où  $r$  est grand. Ceci établit que  $\langle \vec{r} \rangle$  est non nul, et d'autant plus grand que l'excentricité est élevée. Cette valeur moyenne est nécessairement portée par l'axe de symétrie de l'orbite, puisque les composantes de  $\vec{r}$  qui sont symétriques se compensent (voir figure B.2), et donc colinéaire à  $\vec{\mathcal{A}}$ .

3 La dérivée proposée donne :

$$\frac{d}{dt} \rightarrow D = r^2 \dot{\vec{p}} + 2\vec{r} \cdot \dot{\vec{r}} \vec{p} = -K\vec{u}_r + 2\vec{r} \cdot \vec{p} \frac{\vec{p}}{m}$$

dont la valeur moyenne  $\langle D \rangle$  est nulle, en vertu du lemme.

Or il résulte de la première question que  $\vec{\mathcal{A}} = \langle \vec{u}_r \rangle$  et  $\langle \vec{r} \cdot \vec{p} \vec{p} \rangle = \langle p^2 \vec{r} \rangle$ , don on a :

$$K\vec{\mathcal{A}} = \left\langle \frac{K}{r} \vec{r} \right\rangle = 2 \left\langle \frac{p^2}{m} \vec{r} \right\rangle,$$

ce qui établit effectivement l'identité :

$$-\langle E_p \vec{r} \rangle = 4 \langle E_c \vec{r} \rangle = K \langle \vec{u}_r \rangle = K \vec{\mathcal{A}},$$

conformément à l'indication. Bien sûr  $\langle E_p \vec{r} \rangle \neq \langle E_p \rangle \langle \vec{r} \rangle$ , mais on peut écrire :

$$\langle E \vec{r} \rangle = \langle E \vec{r} \rangle = \langle E_c \vec{r} \rangle + \langle E_p \vec{r} \rangle = \left( \frac{1}{4} - 1 \right) K \vec{\mathcal{A}}$$

d'où le résultat, puisque la constante  $E$  peut être sortie de la valeur moyenne.

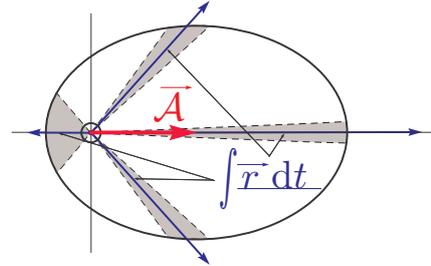


Fig. B.2 – Les secteurs grisés, de même aire, contribuent à part égale à  $\langle \vec{r} \rangle$ . On vérifie la part prépondérante de l'apocentre, et la symétrie par rapport au grand axe.

4 À partir de  $I^2 - L^2 = I^2 \mathcal{A}^2$ , du remplacement de Pauli et de l'équation (B.12), on écrit :

$$\langle \vec{r} \rangle \cdot \vec{\mathcal{A}} = -\frac{3K\mathcal{A}^2}{4E} = \langle \vec{r} \cdot \vec{\mathcal{A}} \rangle = -L^2/mK + \langle r \rangle$$

d'où :

$$\langle r \rangle = L^2/mK - \frac{3K\mathcal{A}^2}{4E} = \frac{I^2}{mK} \left( (1 - \mathcal{A}^2) + \frac{3\mathcal{A}^2}{2} \right) = \frac{2I^2 + I^2\mathcal{A}^2}{2mK} = \frac{3I^2 - L^2}{2mK}, \quad (\text{B.20})$$

qui coïncide avec le résultat demandé pour  $C = mK$ .

La valeur moyenne suivante résulte simplement du viriel et de l'expression de  $E$  en fonction de  $I$  :

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\left\langle \frac{E_p}{K} \right\rangle = -\frac{2E}{K} = \frac{mK}{I^2}. \quad \square$$

La troisième s'obtient à l'aide de la loi des aires et de l'expression de la période :

$$2\pi = \oint \dot{\phi} dt = \frac{L}{m} \oint \frac{dt}{r^2} = \frac{LT}{m} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle,$$

d'où :

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{2\pi m}{T L} = \frac{m^2 K^2}{I^3 L}. \quad \square \quad (\text{B.21})$$

### B.III Vecteur de Laplace réduit et générateurs de Pauli

(introduits par Pauli dans son article historique de 1926)

1 a) Le vecteur  $\vec{\mathcal{A}}$  étant sans dimension, celle de  $\vec{A}$  est le même que celle de  $I$  soit une action (en J·s), comme pour le moment cinétique  $\vec{L}$ . Ce vecteur est le produit de deux constantes du mouvement ( $I$  étant une simple fonction de  $E$ ), et est elle aussi conservée.

b) Compte tenu des relations entre  $I$ ,  $L$  et  $\mathcal{A}$ , on a  $I^2 = L^2 + \mathcal{A}^2$ , d'où :

$$E = -\frac{mK^2}{2(L^2 + \mathcal{A}^2)}. \quad (\text{B.22})$$

2 En utilisant, pour  $\vec{w}$  constant, l'identité  $\partial(\vec{r} \cdot \vec{w})/\partial\vec{r} = \vec{w}$ , il suffit d'écrire :

$$\{(\vec{L} \cdot \vec{u}), \vec{p}\} = \{(\vec{r} \cdot (\vec{p} \wedge \vec{u})), \vec{p}\} = \vec{p} \wedge \vec{u}. \quad (\text{B.23})$$

Il en va de même pour  $\vec{r}$  au prix de deux changements de signe.

3 On en déduit, à l'aide de la formule (9) de l'énoncé :

$$\begin{aligned} \{(\vec{L} \cdot \vec{u}), \vec{L}\} &= \{(\vec{L} \cdot \vec{u}), \vec{r}\} \wedge \vec{p} + \vec{r} \wedge \{(\vec{L} \cdot \vec{u}), \vec{p}\} \\ &= (\vec{r} \wedge \vec{u}) \wedge \vec{p} + \vec{r} \wedge (\vec{p} \wedge \vec{u}) = (\vec{r} \wedge \vec{u}) \wedge \vec{p} + (\vec{u} \wedge \vec{p}) \wedge \vec{r} \\ &= -(\vec{p} \wedge \vec{r}) \wedge \vec{u} = \vec{L} \wedge \vec{u}. \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

En prenant le produit scalaire avec  $\vec{v}$  on obtient bien  $(\vec{L} \wedge \vec{u}) \cdot \vec{v} = (\vec{u} \wedge \vec{v}) \cdot \vec{L}$ .

4 Notons transitoirement  $\vec{J}_1$  et  $\vec{J}_2$  comme  $\vec{J}_\pm$ .

a) On a simplement :

$$\{\vec{J}_\pm \cdot \vec{u}, \vec{J}_\pm\} = \frac{1}{4} \left( \underbrace{\{\vec{L} \cdot \vec{u}, \vec{L}\} + \{\vec{A} \cdot \vec{u}, \vec{A}\}}_{2\vec{L} \wedge \vec{u}} \pm \underbrace{\{\vec{L} \cdot \vec{u}, \vec{A}\} \pm \{\vec{A} \cdot \vec{u}, \vec{L}\}}_{\pm 2\vec{A} \wedge \vec{u}} \right) = \frac{\vec{L} \pm \vec{A}}{2} \wedge \vec{u}. \quad \square \quad (\text{B.25})$$

b) De façon très analogue :

$$\{\vec{J}_\pm \cdot \vec{u}, \vec{J}_\mp\} = \frac{1}{4} \left( \underbrace{\{\vec{L} \cdot \vec{u}, \vec{L}\} - \{\vec{A} \cdot \vec{u}, \vec{A}\}}_{\vec{0}} \mp \underbrace{\{\vec{L} \cdot \vec{u}, \vec{A}\} \pm \{\vec{A} \cdot \vec{u}, \vec{L}\}}_{\vec{0}} \right) = 0. \quad \square \quad (\text{B.26})$$

c) On a par construction  $I^2 = \vec{L}^2 + \vec{A}^2 = (\vec{J}_1 + \vec{J}_2)^2 + (\vec{J}_1 - \vec{J}_2)^2 = 2\vec{J}_1^2 + 2\vec{J}_2^2$ , donc

$$E = -\frac{mK^2}{4(J_1^2 + J_2^2)} . \quad (\text{B.27})$$

d) Si on évalue  $\vec{J}_\pm^2 = (\vec{L} \pm \vec{A})^2/4 = (\vec{L}^2 + \vec{A}^2 \pm 2\vec{L} \cdot \vec{A})/4 = I^2/4$  puisque  $\vec{L} \cdot \vec{A} = 0$ , d'où  $J_\pm = I/2$ .

## C Effets perturbatifs

### C.I Champs électrique et magnétique extérieurs

1 Les forces électrique et magnétique doivent être faibles devant la force coulombienne, ce qui se traduit pour les champs par les relations nécessaires :

$$F \ll F_n = \frac{F_0}{n^4} \quad \text{et} \quad v_n B \ll F_n \quad \text{soit} \quad B \ll \frac{B_0}{n^3} . \quad (\text{C.6})$$

2 L'énergie d'interaction magnétique entre le moment  $\vec{M}$  et le champ s'écrit :

$$W_m = -\vec{M} \cdot \vec{B} = -\frac{q}{2m} \vec{B} \cdot \vec{L} .$$

3 A chaque instant, l'atome a un dipôle  $\vec{d} = q\vec{r}$ , et une énergie d'interaction avec le champ électrique  $V_e = -\vec{d} \cdot \vec{F}$ .

4 L'énergie d'interaction électrique moyenne  $W_e$  s'obtient à l'aide du remplacement de Pauli :

$$W_e = \langle V_e \rangle = -q \langle \vec{r} \rangle \cdot \vec{F} = -\frac{3}{2} q \frac{I^2}{mK} \vec{A} \cdot \vec{F} = -\frac{3}{2} q \frac{I}{mK} \vec{F} \cdot \vec{A}$$

5 a) Il suffit de sommer les deux contributions :

$$W(\vec{L}, \vec{A}) = W_m + W_e = \underbrace{-\frac{q}{2m} \vec{B} \cdot \vec{L}}_{\vec{\Omega}_B} + \underbrace{-\frac{3}{2} q \frac{I}{mK} \vec{F} \cdot \vec{A}}_{\vec{\Omega}_F} . \quad \square \quad (\text{C.7})$$

b) En appliquant les équations (B.9), (B.10) et (C.1), on obtient  $\{\vec{L}, \vec{\Omega} \cdot \vec{L}\} = \vec{\Omega} \wedge \vec{L}$ ,  $\{\vec{A}, \vec{\Omega} \cdot \vec{L}\} = \vec{\Omega} \wedge \vec{A}$  et ainsi de suite. On obtient en définitive :

$$\begin{cases} \left. \frac{d\vec{L}}{dt} \right|_{\text{sec}} = \{\vec{L}, W\} = \vec{\Omega}_B \wedge \vec{L} + \vec{\Omega}_F \wedge \vec{A} , \\ \left. \frac{d\vec{A}}{dt} \right|_{\text{sec}} = \{\vec{A}, W\} = \vec{\Omega}_F \wedge \vec{L} + \vec{\Omega}_B \wedge \vec{A} . \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

c) On peut calculer :

$$\frac{\Omega_B}{2\pi} = \frac{\Omega_0}{4\pi} \frac{B}{B_0} = 1,40 \text{ GHz} , \quad \frac{\Omega_F}{2\pi} = \frac{3\Omega_0}{4\pi} n \frac{F}{F_0} = 1,44 \text{ GHz} ,$$

à comparer à  $\omega/2\pi = \Omega_0/2\pi n^3 \approx 420 \text{ GHz}$ , qui est plusieurs centaines de fois supérieur.

d) On peut bien sûr calculer :

$$\frac{dI^2}{dt} = \vec{L} \cdot (\vec{\Omega}_B \wedge \vec{L} + \vec{\Omega}_F \wedge \vec{A}) + \vec{A} \cdot (\vec{\Omega}_F \wedge \vec{L} + \vec{\Omega}_B \wedge \vec{A})$$

dont le premier et le dernier membre sont identiquement nuls, et le second et le troisième opposés.

De façon bien plus générale,  $\{\mathcal{H}_0, \vec{L}\} = \{\mathcal{H}_0, \vec{A}\} = 0$  entraîne  $\{\mathcal{H}_0, W(\vec{L}, \vec{A})\} = 0$  et donc  $E$  et  $I$  n'évoluent pas.

- 6 Dans le cas d'un champ  $\vec{B}$  seul, les équations (C.8) se simplifient en :

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\Omega}_B \wedge \vec{L} \quad \text{et} \quad \frac{d\vec{A}}{dt} = \vec{\Omega}_B \wedge \vec{A},$$

qui décrivent effectivement un mouvement de précession simultané de  $\vec{L}$  et de  $\vec{A}$  – et donc de l'ensemble de l'ellipse – à la fréquence de Larmor  $\Omega_B/2\pi$ .

- 7 On suppose ici que l'on a un champ électrique  $\vec{F}$  seul.  
a) Les équations (C.8) donnent maintenant le système différentiel couplé :

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\Omega}_F \wedge \vec{A} \quad \text{et} \quad \frac{d\vec{A}}{dt} = \vec{\Omega}_F \wedge \vec{L}.$$

b) Avec ces hypothèses, le mouvement est initialement dans le plan  $xy$ ; la force due au champ électrique étant elle aussi dans ce plan, il n'y pas de raison que la trajectoire en sorte. Une autre façon de le voir est fondée sur l'équation d'évolution de  $\vec{L}$ . En effet les vecteurs  $\vec{\Omega}_F$  et  $\vec{A}$  sont tous les deux dans ce plan, donc  $d\vec{L}/dt$  est forcément dans la direction normale, c'est à dire selon  $z$  :  $\vec{L}$  varie en longueur mais pas en direction. En regardant l'équation d'évolution de  $\vec{A}$ , on constate que la variation est normale à  $z$  et à  $x$ , les composantes correspondantes sont donc constantes.

c) et d) On obtient immédiatement :

$$dL_z/dt = \Omega_F A_y \quad \text{et} \quad dA_y/dt = -\Omega_F L_z.$$

Les deux composantes  $L_z$  et  $A_y$  oscillent de façon harmonique, avec la même amplitude et en quadrature de phase. En prenant comme instant initial celui où  $L_z$  est maximal (et alors  $\vec{A} = A_x \vec{u}_x$ ), on a :

$$L_z(t) = L_0 \cos(\Omega_F t) \quad \text{et} \quad A_y(t) = L_0 \sin(\Omega_F t), \quad (\text{C.9})$$

où  $L_0 = L_z(0)$ . Bien sûr,  $L_z^2 + A_y^2 = I^2 - A_x^2 = Cste$ .  
Dessins : voir figure C.2.

- 8 On considère maintenant des champs  $\vec{B}$  et  $\vec{F}$  simultanés, de directions arbitraires.  
a) On peut écrire :

$$\begin{aligned} W &= \vec{\Omega}_B \cdot (\vec{J}_1 + \vec{J}_2) + \vec{\Omega}_F \cdot (\vec{J}_1 - \vec{J}_2) \\ &= \underbrace{(\vec{\Omega}_B + \vec{\Omega}_F)}_{\vec{\Omega}_1} \cdot \vec{J}_1 + \underbrace{(\vec{\Omega}_B - \vec{\Omega}_F)}_{\vec{\Omega}_2} \cdot \vec{J}_2, \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

et compte tenu des relations établies à la question B.III.4, on obtient des équations du mouvement découplées :

$$\frac{d\vec{J}_1}{dt} = \vec{\Omega}_1 \wedge \vec{J}_1 \quad \text{et} \quad \frac{d\vec{J}_2}{dt} = \vec{\Omega}_2 \wedge \vec{J}_2. \quad (\text{C.11})$$

b) S'il n'y a qu'un champ électrique,  $\vec{\Omega}_1 = -\vec{\Omega}_2 = \vec{\Omega}_F$  : les deux moments précessent en sens inverse autour de l'axe  $x$ . Leurs composantes selon  $x$  sont constantes, on obtient donc  $A_x = Cste$ . Les composantes perpendiculaires tournent en sens inverse dans le plan  $yz$ . Si on suppose que  $L_x = 0$ , on a  $J_{1,x} = -J_{2,x}$  et donc  $\|\vec{J}_{1\perp}\| = \|\vec{J}_{2\perp}\|$  : ces vecteurs tournants ont même norme. Leur somme et leur différence sont donc des vecteurs perpendiculaires, oscillant avec la même amplitude et en quadrature de phase, d'où le résultat.

- 9 On considère de plus que les champs  $\vec{B}$  et  $\vec{F}$  sont lentement variables  
a) Les équations (C.11) sont toujours valables, et la dérivée  $d\vec{J}_{1,2}^2/dt$  donne un produit mixte qui est identiquement nul. De toute façon, d'après C.I.5d),  $I$  ne doit pas varier.

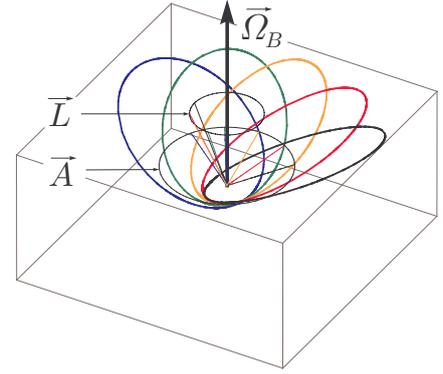


Fig. C.1 – Précession de Larmor des orbites elliptiques dans un champ magnétique faible. On a représenté 5 orbites correspondant à des déphasages  $\Omega_B t$  multiples de  $\pi/6$ . Les cercles horizontaux sont les « trajectoires de  $\vec{L}$  et de  $\vec{A}$  »

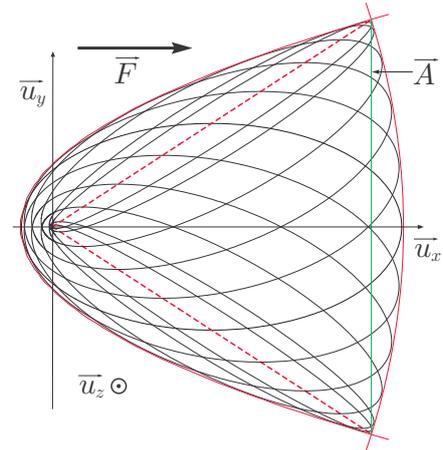


Fig. C.2 – Évolution des orbites dans un champ électrique. Chaque ellipse est parcourue deux fois en sens contraire au cours de la période  $2\pi/\Omega_F$ . Les orbites limites obtenues pour  $\vec{L} = 0$  sont en pointillés. Le vecteur  $\vec{A}$  parcourt le segment figuré en vert. Les deux enveloppes paraboliques ne sont pas demandées.

b) En raison du découplage, on peut faire la démonstration pour une moment cinétique unique  $\vec{J}$  qui précesse autour d'un champ  $\vec{\Omega} = \|\vec{\Omega}\| \vec{u}$ . On s'intéresse à la composante parallèle  $J_{//} = \vec{J} \cdot \vec{u}$  qui est supposée varier lentement. On peut aussi introduire la composante perpendiculaire  $\vec{J}_{\perp} = \vec{J} - J_{//} \vec{u}$ , qui garde une variation rapide. On calcule sans approximation :

$$\frac{dJ_{//}}{dt} = \underbrace{\frac{d\vec{J}}{dt} \cdot \vec{u}}_0 + \vec{J} \cdot \frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{J} \cdot (\vec{\omega} \wedge \vec{u}) = \vec{\omega} \cdot (\vec{u} \wedge \vec{J}), \quad (\text{C.12})$$

où l'on a introduit le vecteur rotation  $\vec{\omega}$  tel que  $d\vec{u}/dt = \vec{\omega} \wedge \vec{u}$ . Bien sûr, si  $\omega = 0$ ,  $J_{//}$  est exactement constant, et le cas qui nous intéresse est celui où  $\omega$  est petit mais non nul : nous allons montrer que  $dJ_{//}/dt$  est beaucoup plus petit que  $\omega J$ . En effet, dans le second membre on a  $\vec{u} \wedge \vec{J} = \vec{u} \wedge \vec{J}_{\perp}$ , la composante  $\vec{J}_{\perp}$  tournant très vite autour de  $\vec{u}$  si bien que sa valeur moyenne est nulle pour  $\vec{u} = Cste$ , et reste négligeable pour  $\omega$  petit. A l'approximation séculaire, on a donc :

$$\left. \frac{dJ_{//}}{dt} \right|_{\text{sec}} = \vec{\omega} \cdot \langle \vec{u} \wedge \vec{J}_{\perp} \rangle \approx 0. \quad \square$$

Pour préciser la condition « tourne lentement », on peut chercher un ordre de grandeur en considérant la loi d'évolution de  $\vec{J}_{\perp}$  :

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{J}_{\perp}}{dt} &= \frac{d\vec{J}}{dt} - \frac{dJ_{//}}{dt} \vec{u} - J_{//} \frac{d\vec{u}}{dt} \\ &= \vec{\Omega} \wedge \vec{J}_{\perp} - (\vec{\omega}, \vec{u}, \vec{J}) \vec{u} - J_{//} \vec{\omega} \wedge \vec{u}. \end{aligned}$$

Si on prend maintenant la valeur moyenne de cette équation, où le membre de gauche s'annule, on constate que  $\langle \vec{\Omega} \wedge \vec{J}_{\perp} \rangle \approx \langle (\vec{\omega}, \vec{u}, \vec{J}) \vec{u} + J_{//} \vec{\omega} \wedge \vec{u} \rangle$  qui est au plus d'ordre  $\omega J$ . Donc  $\langle \vec{u} \wedge \vec{J}_{\perp} \rangle$  est au plus d'ordre  $\omega/\Omega J$ . Il en résulte que  $dJ_{//}/dt$  est d'ordre  $\omega^2/\Omega J$ , qui est effectivement petit par rapport à  $\omega$  si et seulement si  $\omega \ll \Omega$ .

Pour  $J_1$  et  $J_2$ , cette « condition d'adiabaticité » sera généralement satisfaite, sauf dans le cas très particulier où les champs sont à peu près parallèles et dans un rapport  $F/B$  tel que  $\Omega_1$  ou  $\Omega_2$  prenne des valeurs très faibles.

## C.II États de Rydberg du Lithium

- 1 Nous avons vu que le rayon au péricentre est  $L^2/mK(1 + \mathcal{A})$ , qui est au pire de l'ordre de  $L^2/2mKS$  si l'excentricité est assez grande ( $\ell \ll n$ ), essentiellement indépendante de  $L$ . La condition de non pénétration est donc :

$$\frac{L^2}{2mK} \gtrsim R \quad \text{soit} \quad \ell \gtrsim \sqrt{\frac{2R}{a_0}} \simeq 1,6,$$

c'est à dire que l'effet de pénétration devient négligeable pour  $\ell \geq 2$ .

- 2 a) Dans un modèle d'électron élastiquement lié (distribution de charge uniforme) on obtient généralement  $\alpha_D \sim R^3$  où  $R$  est le rayon ionique. Cela donne  $\alpha_D \simeq 3,4 \times 10^{-31} \text{ m}^3 \simeq 2,3 a_0^3$ .

b) Le champ créé par l'électron sur le coeur a pour expression  $\vec{E} = -(K/e)/r^2 \vec{u}_r$ . En prenant l'énergie d'interaction indiquée, son expression en fonction de la distance  $r$  est :

$$V_{\text{pol}}(r) = -\frac{1}{2} \vec{d} \cdot \vec{E} = -\frac{\epsilon_0 \alpha_D}{2} \vec{E}^2 = -\frac{\epsilon_0 \alpha_D (K/e)^2}{2 r^4},$$

qui est de la forme attendue avec  $K' = \epsilon_0 \alpha_D (K/e)^2/2$ , qui est de l'ordre de  $(R/a_0)^3 a_0^4 E_0 \simeq 8 \times 10^{-59} \text{ J} \cdot \text{m}^4$ . L'expression en fonction des unités atomiques montre que  $K'$  est aussi de l'ordre de l'unité, et c'est donc la dépendance en  $r^{-4}$  qui rend ce terme perturbatif.

- 3 a) On obtient, d'après la formule (B.6) de l'énoncé :

$$\Delta E_{n,\ell} = \langle V_{\text{pol}} \rangle = -K' \left\langle \frac{1}{r^4} \right\rangle = -K' (mK)^4 \frac{3I^2 - L^2}{2I^5 L^5} = -\frac{K' 3n^2 - \ell^2}{a_0^4 2n^5 \ell^5} \simeq -\frac{K'}{a_0^4} \frac{3}{2n^3 \ell^5}.$$

b) En faisant le développement limité proposé, il vient :

$$\frac{\Omega_{n,n'}}{2\pi} = c\mathcal{R} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} + \frac{2\delta}{n^3} - \frac{2\delta'}{n'^3} \right), \quad (\text{C.13})$$

ce qui suggère que les niveaux d'énergie sont déplacés par rapport à ceux de l'hydrogène d'une quantité :  $\Delta E_{n,\ell} = 2hc\mathcal{R}\delta_\ell/n^3$  qui est bien de la forme obtenue par l'effet de polarisation. Avec un peu d'algèbre, dont  $2hc\mathcal{R} = E_0$ , on obtient :

$$\delta_\ell = \frac{3}{16\pi} \frac{\alpha_D}{a_0^3} \ell^{-5}, \quad (\text{C.14})$$

qui est bien homogène, et prédit une dépendance en  $\ell^{-5}$  du défaut quantique.

- 4 a) On peut tracer une droite dans le diagramme log-log qui passe par tous les points de  $\ell > 1$  et non loin de celui pour  $\ell = 1$ , ce qui montre que l'on a bien une loi de puissance  $\ell^s$ . On obtient une variation de  $\delta$  de  $10^{-5}$  à  $5 \times 10^{-2}$ , soit  $\Delta \log \delta = -3,7$  pour une variation de  $\ell$  de 1 à 6,8, soit  $\Delta \log \ell = 0,83$ . La pente dans le diagramme est donc  $s = -3,7/0,83 \approx -4,5$ .
- b) La valeur obtenue, sans s'en éloigner beaucoup, ne coïncide pas avec la valeur attendue  $s = -5$ . Le modèle donne bien la tendance générale, mais néglige probablement d'autres corrections au potentiel d'interaction, dont l'effet de pénétration qui n'est pas entièrement négligeable à la précision recherchée.
- c) En prenant la valeur tabulée pour  $\ell = 4$ , on obtient  $\alpha_D/a_0^3 \simeq 1,5$ , qui est bien de l'ordre de grandeur attendu<sup>1</sup>.
- d) Clairement, la valeur mesurée pour  $\ell = 0$  est notablement trop grande pour être donnée par ce modèle, ce qui n'est guère surprenant puisque les effets de pénétration sont dominants pour  $\ell = 0$ , et sans doute encore importants pour  $\ell = 1$ .
- 5 On a obtenu un potentiel central qui n'affecte pas  $\vec{L}$ . Dans l'approximation séculaire, on vérifie immédiatement que  $\{\vec{L}, W\} = 0$ . C'est différent pour  $\vec{A}$ , puisque  $\{\vec{A}, L^2\} \neq 0$ . On peut écrire :

$$\left. \frac{d\vec{A}}{dt} \right|_{\text{sec}} = \{\vec{A}, W\} = \left. \frac{\partial W}{\partial \vec{L}} \right|_{\vec{A}} \wedge \vec{A} = \underbrace{\left. \frac{dW}{dL} \right|_{\vec{A}}}_{\vec{\Omega}_{\text{pol}}} \wedge \vec{A} \quad (\text{C.15})$$

Ce qui signifie que  $\vec{A}$  précesse autour de  $\vec{L}$ , avec une fréquence  $\Omega_{\text{pol}}$  qui est la *dérivée* de la perturbation, tandis que les décalages de fréquences sont donnés par des différences *discrètes* de cette même perturbation, en sorte que :

$$\Omega = \frac{dW}{dL} \approx \frac{\Delta W}{\Delta L} = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta W}{\Delta \ell}.$$

Ceci est bien l'expression plus générale du principe de correspondance du A.II.

## D Émission spontanée

### D.I Rayonnement dipolaire

- 1 On doit supposer  $a \ll \lambda$  et  $a \ll r$  pour pouvoir traiter le dipôle comme ponctuel. En outre on a négligé le champ proche en  $(kr)^{-3}$  et  $(kr)^{-2}$ , ce qui est valable seulement si  $\lambda \ll r$ . En définitive, cette expression est correcte si  $a \ll \lambda \ll r$ .
- 2 D'après le A.II, l'ordre de grandeur des longueurs d'onde des transitions est  $\lambda_0 = 2\pi c/\Omega_0$ . Or  $\lambda_0/2\pi a_0 = c/\omega_0 a_0 = c \cdot (\hbar^3/mK^2) \cdot (mK/\hbar^2) = \hbar c/K = 1/\alpha$  où l'on a reconnu la constante de structure fine  $\alpha \sim 1/100$  ce qui confirme que  $a_0 \ll \lambda_0$ .
- 3 De  $\vec{E} = (\vec{\mathcal{E}} + \vec{\mathcal{E}}^*)/2$  et de même pour  $\vec{B}$  (\* désignant la conjugaison complexe), on déduit le résultat classique :

$$\langle \vec{\Pi} \rangle = \frac{1}{2\mu_0} \Re(\vec{\mathcal{E}} \wedge \vec{\mathcal{B}}^*) \quad (\text{D.6})$$

puisque les termes en  $\vec{\mathcal{E}} \wedge \vec{\mathcal{B}}$  et son complexe conjugué évoluent à la fréquence  $\pm 2\omega$ .

- 4 On constate que le vecteur de Poynting ainsi construit est en  $1/r^2$ . Son flux total à travers une sphère  $S$  de rayon  $R$  ne dépend donc pas de  $R$ . Comme  $\vec{u}_\theta \wedge \vec{u}_\varphi = \vec{u}_r$ , la puissance moyenne rayonnée s'écrit :

$$\mathcal{P} = \int_S \langle \vec{\Pi} \rangle \cdot d\vec{S} = \frac{|d|^2 \omega^4}{32\pi^2 \epsilon_0 c^3} \int \sin^2 \theta d\Omega = \frac{|d|^2 \omega^4}{12\pi \epsilon_0 c^3}; \quad (\text{D.7})$$

1. C'est une approximation raisonnable puisque la valeur mesurée par une version raffinée de cette méthode donne  $\alpha_D/a_0^3 = 2,39 \pm 0,01$

## D.II Émission d'un « état circulaire »

L'électron émet le même rayonnement qu'un dipôle tournant à la vitesse angulaire  $\omega$ .

- 1 On a  $\vec{r} = a(\cos\omega t \vec{u}_x \pm \sin\omega t \vec{u}_y)$ , soit en représentation complexe  $\underline{r} = a(e^{i\omega t} \vec{u}_x \pm e^{i\omega t + \pi/2} \vec{u}_y)$ . Donc  $\underline{d}_1 = qa e^{i\omega t}$  et  $\underline{d}_2 = \pm i qa e^{i\omega t}$ , le signe dépendant du sens de rotation.
- 2 Les termes d'interférence normalement attendus entre les champs émis par  $\underline{d}_1$  et  $\underline{d}_2$  sont proportionnels à  $\Re(\vec{\mathcal{E}}_1 \wedge \vec{\mathcal{B}}_2^*) \propto \Re(\underline{d}_1 \cdot \underline{d}_2^*) = 0$  : les deux dipôles sont en *quadrature* de phase, donc les champs rayonnés n'interfèrent pas. On a donc bien additivité.
- 3 La puissance totale moyenne rayonnée  $\mathcal{P}$  est donc le double de celle obtenue à l'équation (D.7), soit  $\mathcal{P} = q^2 a^2 \omega^4 / 6\pi\epsilon_0 c^3$ . En utilisant  $K = q^2 / 4\pi\epsilon_0$  et la troisième loi de Newton sous la forme  $\omega^2 = \omega_0^2 (a_0/a)^3$ , il vient :

$$\mathcal{P} = \frac{2}{3} \left(\frac{a_0}{a}\right)^4 \underbrace{\frac{K}{a_0}}_{E_0} \omega_0 \underbrace{\left(\frac{\omega_0 a_0}{c}\right)^3}_{\alpha^3} = -\frac{dE}{dt} \quad \text{car } \mathcal{P} \text{ représente l'énergie } \textit{perdue}.$$

- 4 a) On peut supposer la variation lente car  $\alpha^3$  est très petit et le mouvement reste circulaire uniforme à l'échelle de la période. On a toujours  $E = -K/2a$ , d'où :

$$-\frac{K}{2} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{a}\right) = -\frac{2}{3} \omega_0 E_0 \left(\frac{a_0}{a}\right)^4 \quad \Rightarrow \quad 3 \left(\frac{a}{a_0}\right)^2 \frac{da/a_0}{dt} = -4\alpha^3 \omega_0 \underbrace{\frac{E_0 a_0}{K}}_1 \quad (\text{D.8})$$

qui représente bien une diminution *lente* de  $a$  à l'échelle de la période képlérienne.

b) La dérivée de  $(a/a_0)^3$  (membre de gauche) est donc égale à une constante, et en notant  $t_0$  pour l'instant initial, on a immédiatement :

$$\left(\frac{a(t)}{a_0}\right)^3 = \left(\frac{a(t_0)}{a_0}\right)^3 - 4\alpha^3 \omega_0 (t - t_0). \quad (\text{D.9})$$

qui correspond à une spirale lentement décroissante<sup>1</sup>.

- 5 a) L'unité de temps atomique est  $T_0 = 2\pi/\omega_0$ . La durée de vie de l'état circulaire fait intervenir une petite portion de la spirale, telle que :  $4\omega_0 \alpha^3 \tau_n = (n^6 - (n-1)^6) \approx 6n^5$ , d'où :

$$\tau_n = \frac{3\alpha^{-3}}{2\omega_0} n^5 = \frac{3T_0}{4\pi\alpha^3} n^5. \quad (\text{D.10})$$

Donc  $\tau_n \gg T_0$ , car  $\alpha^3 \ll 1$ , et d'autant plus que  $n$  est grand.

b) On trouve, pour  $n = 2$ ,  $\tau_2 \approx 3$  ns qui est bien l'ordre de grandeur des durées de vie atomiques observés pour des niveaux faiblement excités. Pour  $n = 30$ , on obtient une durée de vie étonnamment élevée :  $\tau_{30} \approx 2,3$  ms.

- 6 Considérant que  $\omega_n = \omega_0/n^3$ , et  $a_n = a_0 n^2$ , et  $E_0 = \hbar\omega_0$  d'après la question A.II.2, on peut écrire :

$$\frac{\mathcal{P}_n}{\hbar\omega_n} = \frac{2\alpha^3}{3} \omega_0 \frac{n^3}{n^8} = \frac{1}{\tau_n} \quad (\text{D.11})$$

Dans la question A.II.2, on avait vu que la transition  $n \rightarrow n-1$  emportait un quantum d'énergie  $\Delta E = \hbar\omega_n$ . Il apparaît donc que l'efficacité de ce processus (son taux par unité de temps) est donnée par la puissance rayonnée divisée par ce même quantum.

- 7 a) Le mouvement elliptique est toujours périodique, mais il n'est plus uniforme. Le spectre rayonné doit donc contenir tous les harmoniques de la pulsation mécanique  $\omega$ .
- b) On constate sur la figure que, pour  $n$  grand, les niveaux deviennent quasiment équidistants (en effet  $(\omega_n - \omega_{n-1})/\omega_n \sim 1/n$ ). L'émission à  $p\omega_n$ , correspondant à des photons d'énergie  $\hbar p\omega_n$  est donc associée à une transition  $n \rightarrow n-p$ .
- c) Dans ce contexte, la particularité de l'état circulaire est de n'émettre que sur la transition  $n \rightarrow n-1$ . En effet une transition  $n \rightarrow n-p$  avec  $p > 1$  implique forcément des niveaux dont le moment angulaire  $\ell$  est inférieur de  $p$  unités, puisque  $\ell \leq n$ . Une telle transition est contraire à l'hypothèse selon laquelle le photon ne peut emporter qu'un seul quantum de moment cinétique.
- d) D'après cette analyse, l'équation (D.3) pourrait se généraliser à condition de calculer la puissance  $\mathcal{P}_{p\omega}$  rayonnée à chaque rang harmonique  $p$ , et en sommant les différentes contributions sous la forme :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\mathcal{P}_\omega}{\hbar\omega} + \frac{\mathcal{P}_{2\omega}}{2\hbar\omega} + \frac{\mathcal{P}_{3\omega}}{3\hbar\omega} + \dots \quad (\text{D.12})$$

1. On peut remarquer que cette spirale a la particularité que  $a \rightarrow 0$  en un temps fini, ce qui traduit l'instabilité fondamentale de l'atome classique.

En toute rigueur, les niveaux ne sont pas équidistants, mais l'émission se répartit toujours entre les différents niveaux inférieurs selon :

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{n' < n} \frac{\mathcal{P}_{n,n'}}{E_n - E_{n'}} , \quad (\text{D.13})$$

où  $\mathcal{P}_{n,n'}$  est la puissance rayonnée à la fréquence de Bohr  $\omega_{n,n'} = (E_n - E_{n'})/\hbar$ .

Cela pose toutefois plusieurs problèmes :

- il faut déterminer explicitement la décomposition de Fourier de  $\vec{r}(t)$  ;
- il n'est pas évident que les simplifications sur l'additivité de la puissance entre  $d_1$  et  $d_2$  se généralisent ;
- même si l'on franchit les étapes précédentes, on obtiendra pas – sauf pour le circulaire – une expression « fermée » mais une somme pouvant comporter de nombreux termes ;
- en toute rigueur, il ne suffit pas de pouvoir prendre en compte la non-équidistance des niveaux en sommant sur toutes les transitions, mais il faudrait définir  $\mathcal{P}_{n,n'}$  de façon quantique...

### D.III Force de réaction de rayonnement

- 1 a) On sait que  $m\ddot{\vec{r}}$  est une force. Donc si on dérive encore une fois et qu'on multiplie par un temps, on a toujours une force. Il suffit donc de montrer que la constante  $\tau_{\text{AL}}$  est un temps. Or on a :

$$\tau_{\text{AL}} = \frac{2}{3} \frac{K}{mc^3} = \frac{2}{3} \frac{E_0 a_0}{mc^3} = \frac{2}{3} \underbrace{\frac{E_0/mc^2}{\alpha^2}}_{\alpha^2} \underbrace{a_0/c}_{\alpha T_0} ,$$

ceci montre que  $\tau_{\text{AL}}$  est bien un temps, qui dans le cadre du modèle de Bohr est  $\alpha^{-3} \sim 10^6$  fois plus *long* que la période képlérienne, et la force associée est donc  $\sim 10^{-6}$  fois inférieure à la la force coulombienne.

b) On a (cf. A.I.7) :

$$\langle \mathcal{P}_{\text{AL}} \rangle = \langle \vec{\mathcal{F}}_{\text{AL}} \cdot \vec{v} \rangle = m \tau_{\text{AL}} \langle \dot{\vec{v}} \cdot \vec{v} \rangle = -m \tau_{\text{AL}} \langle \dot{v}^2 \rangle , \quad (\text{D.14})$$

puisque la valeur moyenne de la dérivée de  $\vec{v} \cdot \vec{v}$ , quantité bornée, est nulle.

Pour le mouvement circulaire, on a une accélération  $d^2\vec{r}/dt^2 = -K/ma^2 \vec{u}_r$  et donc on retrouve bien :

$$\mathcal{P} = \frac{2}{3} \frac{K}{c^3} \left\langle \left( \frac{-K}{ma^2} \right)^2 \right\rangle = \frac{2}{3} \underbrace{\left( \frac{K/\hbar c}{\alpha^3} \right)^3}_{\alpha^3} \underbrace{\left( \frac{\hbar^3/m^2 a_0^4}{E_0 \omega_0} \right)}_{E_0 \omega_0} \left( \frac{a_0}{a} \right)^4 . \quad (\text{D.15})$$

- 2 On peut maintenant appliquer cette méthode à une orbite elliptique quelconque, en utilisant ce qui précède ainsi que B.II.4 :

$$\langle \mathcal{P}_{\text{AL}} \rangle = \frac{2}{3} \alpha^3 E_0 \omega_0 \left\langle \left( \frac{a_0}{r} \right)^4 \right\rangle = \frac{2}{3} \alpha^3 E_0 \omega_0 \frac{3n^2 - \ell^2}{2n^5 \ell^5} . \quad (\text{D.16})$$

On retrouve la formule bien sûr (D.15) pour l'orbite circulaire avec  $\ell = n$ . La dernière fraction est  $\sim n^{-3} \ell^{-5}$  : les états de faible moment angulaire, à énergie donnée, émettent une puissance bien plus élevée, dans un rapport  $(n/\ell)^5$ , et on s'attend donc à une durée de vie plus courte.

- 3 a) L'indication résulte d'une intégration par partie (cf. A.I.7), et de l'approximation séculaire, dans laquelle l'accélération est donnée par la seule force coulombienne :

$$\langle \vec{r} \wedge \ddot{\vec{r}} \rangle = \underbrace{\left\langle \frac{d}{dt} (\vec{r} \wedge \dot{\vec{r}}) \right\rangle}_0 - \langle \dot{\vec{r}} \wedge \dot{\vec{r}} \rangle = - \left\langle \frac{\vec{p}}{m} \wedge \left( - \frac{K \vec{r}}{m r^3} \right) \right\rangle = - \frac{K}{m^2} \left\langle \frac{\vec{L}}{r^3} \right\rangle .$$

Le couple moyen  $\langle \vec{\Gamma} \rangle$  exercé sur l'électron s'écrit alors :

$$\langle \vec{\Gamma} \rangle = \frac{2K}{3c^3} \left( - \frac{K}{m^2} \left\langle \frac{\vec{L}}{r^3} \right\rangle \right) = - \frac{2}{3} \alpha^3 \underbrace{\frac{\hbar^3}{m^2 K a_0^3}}_{\omega_0} \left\langle \left( \frac{a_0}{r} \right)^3 \right\rangle \vec{L} = - \frac{2\alpha^3}{3} \omega_0 \frac{\hbar^6}{I^3 L^3} \vec{L} , \quad (\text{D.17})$$

b) On constate que  $\langle \vec{\Gamma} \rangle$  est colinéaire à  $\vec{L}$ , ce qui prouve que ce dernier diminue sans changer de direction. La vitesse de variation est en outre en  $\alpha^3$  ce qui justifie un traitement séculaire, et on a donc :

$$\frac{dL}{dt} = - \frac{2\alpha^3}{3} \omega_0 \frac{\hbar^6}{I^3 L^2} . \quad (\text{D.18})$$

- 4 On peut transposer à  $\vec{L}$  le bilan que l'on a fait précédemment pour  $E$  : puisque chaque photon emporte exactement un quantum de moment cinétique, on doit nécessairement obtenir cette équation.<sup>2</sup>
- 5 On en tire, pour une orbite elliptique :

$$\tau_{n,\ell} = \frac{3\alpha^{-3}}{2\omega_0} n^3 \ell^2, \quad (\text{D.19})$$

qui redonne, bien sûr, la même valeur pour le circulaire. En effet, dans ce cas,  $dL/dt$  et  $dE/dt$  coïncident, à un facteur  $\omega_n = \omega_0/n^3$  près.

Dans le cas général, c'est l'hypothèse que chaque photon emporte le même moment cinétique quelle que soit son énergie qui permet d'obtenir une évaluation de  $\tau_{n,\ell}$  sous une forme fermée.

- 6 On réécrit  $dE/dt = -\langle \mathcal{P}_{AL} \rangle$  en termes de  $dI/dt$ , et avec des variables  $n$  et  $\ell$  continues, on obtient :

$$\dot{\ell} = -\frac{2}{3} \Lambda \frac{1}{n^3 \ell^2} \quad \text{et} \quad \dot{n} = -\frac{2}{3} \Lambda \frac{3n^2 - \ell^2}{2n^2 \ell^5}, \quad (\text{D.20})$$

où l'on a posé  $\Lambda = \alpha^3 \omega_0$ . On peut alors calculer :

$$\dot{\mathcal{A}} = \frac{d}{dt} \sqrt{1 - \ell^2/n^2} = \frac{(\ell \dot{n} - n \dot{\ell}) \ell}{n^2 \mathcal{A}} = -\frac{2}{3} \Lambda \frac{\mathcal{A}}{n^3 \ell^3}. \quad (\text{D.21})$$

Cette équation, même si elle n'élimine pas totalement les variables  $\ell$  et  $n$ , est très intéressante, car elle montre que le rayonnement dipolaire impose une diminution systématique de l'excentricité  $\mathcal{A}$ , d'autant plus rapide que  $\ell$  est faible (ie  $\mathcal{A}$  grand) : les orbites tendent toutes à devenir circulaires.

Plus simplement, on peut comparer les taux de décroissance relatifs de  $n$  et de  $\ell$  :

$$\frac{(\dot{n}/n)}{(\dot{\ell}/\ell)} = \frac{3n^2}{2\ell^2} - \frac{1}{2}.$$

Comme  $n \geq \ell$  ce rapport est toujours plus grand que 1 ; lorsque  $n \gg \ell$ , il est très grand ce qui signifie que  $n$  décroît bien plus vite que  $\ell$  ; en revanche lorsque  $n \approx \ell$ , ce rapport est de l'ordre de 1, les deux nombres quantiques ont des variations similaires. Un point fixe est obtenu lorsque  $\ell = n$  car alors  $\dot{\ell} = \dot{n} = n^{-5}$ , et on retrouve ainsi le comportement des atomes circulaires.

- 7 a) Sans la question précédente, on devrait s'étonner que les transitions observées ne diminuent  $n$  que d'une unité, alors que de très nombreuses voies sont ouvertes pour une orbite elliptique quelconque. Comme observé à la question D.I.7.c) ci-dessus, cette propriété est caractéristique des orbites circulaires qui n'ont pas d'autre choix que la voie  $n \rightarrow n - 1$  en raison de la « règle de sélection » sur le moment cinétique.
- b) L'observation de la question 6 nous montre que c'est le processus d'émission lui-même qui rend les orbites progressivement circulaires. Si l'équation obtenue précédemment, avec des variables continues, peut mettre un temps relativement long à converger vers  $\mathcal{A} = 0$ , la quantification du moment cinétique rend le processus bien plus efficace : un grand nombre d'atome « tombent » fatalement dans ces états, et doivent alors nécessairement produire la cascade observée.

## E L'atome en mécanique quantique

### E.I La symétrie du problème de Kepler en mécanique quantique

#### 1 Moment cinétique

a) le moment cinétique fait apparaître des produits de composantes de  $\vec{r}$  et de  $\vec{p}$  selon des axes différents, comme  $L_x = y p_z - z p_y$ , qui comment donc, et les deux expressions sont donc bien identiques. On peut alors écrire :  $\widehat{L} \cdot \widehat{r} = (\vec{r} \wedge \vec{p}) \cdot \vec{r} = -(\vec{p} \wedge \vec{r}) \cdot \vec{r} = -\vec{p} \cdot (\vec{r} \wedge \vec{r}) = 0$  puisque les composantes de  $\vec{r}$  commutent entre elles. Il en est de même pour  $\vec{p}$

b) On a :

$$[\widehat{L} \cdot \widehat{r}, \widehat{r}] = -[(\vec{r} \wedge \vec{u}) \cdot \vec{p}, \vec{r}] = \sum_j (\vec{u} \wedge \vec{r})_j [p_j, \vec{r}] = \sum_j (\vec{u} \wedge \vec{r})_j \left( -i\hbar \frac{\partial p_j}{\partial \vec{p}} \right) = i\hbar \vec{r} \wedge \vec{u} \quad \square \quad (\text{E.19})$$

et de même pour  $\vec{p}$ .

2. Bien sûr, c'est une approximation, certaines désexcitations donnent  $\Delta\ell = +1$ , mais on peut monter en mécanique quantique qu'elles sont très défavorisées dès que  $n - \ell > \ell$ .

c) On a :

$$\begin{aligned} [\widehat{L}^2, \widehat{V}] &= \sum_j L_j [L_j, \widehat{V}] L_j + L_j [L_j, \widehat{V}] = \sum_j L_j [\vec{L} \cdot \vec{u}_j, \widehat{V}] L_j + L_j [\vec{L} \cdot \vec{u}_j, \widehat{V}] \\ &= i\hbar \sum_j \widehat{V} \wedge \vec{u}_j L_j + L_j \widehat{V} \wedge \vec{u}_j = i\hbar (\widehat{V} \wedge \underbrace{\sum_j L_j \vec{u}_j}_{\vec{L}} - \underbrace{\sum_j L_j \vec{u}_j}_{\vec{L}} \wedge \widehat{V}) . \quad \square \end{aligned}$$

d) Une « constante du mouvement »  $\widehat{C}$  est une observable dont la valeur moyenne  $\langle \psi | \widehat{C} | \psi \rangle$  n'évolue pas au cours du temps, quel que soit le ket  $|\psi\rangle$ . Or on déduit de l'équation de Schrödinger le théorème d'Ehrenfest :

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | \widehat{C} | \psi \rangle = i\hbar \langle \psi | [\widehat{C}, \widehat{H}] | \psi \rangle ,$$

et il faut donc que l'opérateur  $[\widehat{C}, \widehat{H}] = 0$  soit nul.

e) On peut écrire :

$$\begin{aligned} [\widehat{L}, \widehat{H}_0] &= \widehat{r} \wedge [\widehat{p}, \widehat{H}_0] + [\widehat{r}, \widehat{H}_0] \wedge \widehat{p} = \widehat{r} \wedge [\widehat{p}, -K/\widehat{r}] + [\widehat{r}, \widehat{p}^2/2m] \wedge \widehat{p} \\ &= \widehat{r} \wedge \left( i\hbar \frac{K \widehat{u}_r}{\widehat{r}^2} \right) + \left( i\hbar \frac{\widehat{p}}{m} \right) \wedge \widehat{p} = 0 . \quad \square \end{aligned}$$

## 2 Vecteur de Laplace

a) La règle de construction des observables quantiques analogues à des grandeurs classiques veut que l'on symétrise les opérateurs afin qu'ils soient auto-adjoints. On vérifie immédiatement que  $(\widehat{L} \wedge \widehat{p})^+ = -\widehat{p} \wedge \widehat{L}$ .

b) Calculons tout d'abord :  $\widehat{L} \wedge \widehat{p} = ((\widehat{r} \wedge \widehat{p}) \wedge \widehat{p}) = (\widehat{r} \cdot \widehat{p}) \widehat{p} - \widehat{r} \widehat{p}^2$  en utilisant le fait que l'ordre de  $\widehat{r}$  et  $\widehat{p}$  dans  $\widehat{L}$  est indifférent. On en déduit que :

$$\widehat{L} \cdot (\widehat{p} \wedge \widehat{L}) = (\widehat{L} \wedge \widehat{p}) \cdot \widehat{L} = (\widehat{r} \cdot \widehat{p}) \underbrace{(\widehat{p} \cdot \widehat{L})}_0 - \underbrace{(\widehat{r} \cdot \widehat{L})}_0 \widehat{p}^2 = 0 \quad \text{car} \quad [\widehat{p}^2, \widehat{L}] = 0 .$$

Par ailleurs,  $\widehat{L} \cdot (\widehat{L} \wedge \widehat{p}) = (\widehat{L} \wedge \widehat{L}) \cdot \widehat{p} = i\hbar \widehat{L} \cdot \widehat{p} = 0$ . Donc

$$\widehat{L} \cdot \widehat{\mathcal{A}} = \frac{\widehat{L} \cdot (\widehat{L} \wedge \widehat{p}) - \widehat{L} \cdot (\widehat{p} \wedge \widehat{L})}{2mK} + \widehat{L} \cdot \widehat{u}_r = 0 . \quad \square$$

Les opérateurs  $\widehat{L}$  et  $\widehat{\mathcal{A}}$  étant auto-adjoints,  $(\widehat{L} \cdot \widehat{\mathcal{A}})^+ = \widehat{\mathcal{A}} \cdot \widehat{L}$ , qui est donc nul aussi.

c) La conservation de  $\widehat{L}$ , puis l'indication, avec l'équation (E.7) nous donnent successivement :

$$\begin{aligned} [\widehat{\mathcal{A}}, \widehat{H}_0] &= \frac{\widehat{L} \wedge [\widehat{p}, \widehat{H}_0] - [\widehat{p}, \widehat{H}_0] \wedge \widehat{L}}{2mK} + [\widehat{u}_r, \widehat{H}_0] \\ &= -i\hbar \frac{\widehat{L} \wedge (K \widehat{u}_r / \widehat{r}^2) - (K \widehat{u}_r / \widehat{r}^2) \wedge \widehat{L}}{2mK} - \left[ \frac{\widehat{L}^2}{2m\widehat{r}^2}, \widehat{u}_r \right] \\ &= -i\hbar \frac{\widehat{L} \wedge \widehat{u}_r - \widehat{u}_r \wedge \widehat{L}}{2m\widehat{r}^2} - i\hbar \frac{\widehat{u}_r \wedge \widehat{L} - \widehat{L} \wedge \widehat{u}_r}{2m\widehat{r}^2} = 0 \end{aligned}$$

## 3 Vecteur de Laplace réduit et générateurs de Pauli

a) Lorsqu'on réordonne les termes pour faire apparaître le hamiltonien  $\widehat{H}_0$  dans  $\widehat{\mathcal{A}}^2$  on doit à plusieurs reprises faire intervenir des commutateurs qui résultent en un terme constant additionnel. Par homogénéité, vu son emplacement, il doit être de la dimension de  $\hbar^2$ . A la limite classique, on a bien sûr  $L^2 \gg \hbar^2$  et/ou  $A^2 \gg \hbar^2$ , et cette petite correction devient négligeable.

b) Il suffit de calculer le carré des générateurs  $\widehat{J}_{\pm}^2$  :

$$\widehat{J}_{\pm}^2 = \frac{1}{4} (\widehat{L}^2 + \widehat{A}^2 \pm 0 \pm 0) = \frac{1}{4} (\widehat{I}^2 - \hbar^2) \quad (\text{E.20})$$

#### 4 Spectre de l'hydrogène

a) On sait que  $\widehat{H}_0$  commute avec  $\widehat{L}$  et  $\widehat{A}$  et donc avec  $\widehat{J}_1$  et  $\widehat{J}_2$ , c'est à dire en particulier avec toutes leurs composantes, ainsi qu'avec leur carré. De plus  $\widehat{J}_1$  et  $\widehat{J}_2$  commutent l'un avec l'autre. En conséquence, les observables proposées constituent un ensemble où toutes commutent deux à deux, ce qui permet leur diagonalisation simultanée.

b) Les valeurs propres de moments cinétiques  $\widehat{J}_1^2$  et  $\widehat{J}_2^2$  sont nécessairement de la forme  $j(j+1)\hbar^2$  où  $j$  est un entier ou un demi-entier positif ou nul, identique pour les deux générateurs. Les valeurs propres de  $\widehat{J}_1 \cdot \vec{u}_1$  et  $\widehat{J}_2 \cdot \vec{u}_2$  sont donc données par des nombres  $m_1$  et  $m_2$ , généralement distincts, tous deux compris entre  $-j$  et  $j$ .

c) D'après (E.13) et (E.20) on peut écrire, de façon analogue à l'équation (B.27) :

$$\widehat{H}_0 = -\frac{mK^2}{2(\widehat{A}^2 + \widehat{L}^2 + \hbar^2)} = -\frac{mK^2}{4(\widehat{J}_1^2 + \widehat{J}_2^2) + 2\hbar^2}$$

dont les valeurs propres sont de la forme :

$$E(j) = -\frac{mK^2}{4(2j(j+1)\hbar^2) + 2\hbar^2} = -\frac{E_0}{8(j + \frac{1}{2})^2}. \quad (\text{E.21})$$

Cela démontre de façon rigoureuse que les niveaux d'énergie du hamiltonien quantique  $\widehat{H}_0$  sont de la forme obtenue de façon heuristique par Bohr. Il faut pour cela identifier  $n \equiv 2(j + \frac{1}{2})$ . On vérifie avec satisfaction que  $n$  prend successivement toutes les valeurs de  $\mathbb{N}^*$  (soit  $1, 2, 3, \dots$ ) lorsque  $j$  prend les valeurs de  $\mathbb{N}/2$  (soit  $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ ).

d) Compte tenu de ce qui précède, la valeur de  $j$  fixe la valeur propre de  $\widehat{H}_0$ ,  $\widehat{J}_1^2$  et  $\widehat{J}_2^2$ . Restent donc  $m_1$  et  $m_2$ , soit trois nombres quantiques, ce qui permet d'écrire les états sous la forme  $|n, m_1, m_2\rangle = |j, m_1\rangle \otimes |j, m_2\rangle$ .

e) Le nombre d'états orthogonaux de même énergie s'obtient en considérant le nombre paires  $(m_1, m_2)$  possibles. Or ces deux nombres quantiques prennent indépendamment les  $2j + 1 = n$  valeurs accessibles, ce qui donne  $n^2$  paires possible. La dégénérescence des niveaux est donc  $n^2$ .

#### 5 États paraboliques

On se place dans cette question dans le cas particulier où  $\vec{u}_1 = \vec{u}_2 = \vec{u}_z$ .

a) Si  $\vec{u}_1 = \vec{u}_2 = \vec{u}_z$ , les composantes de  $\widehat{J}_1^2$  et  $\widehat{J}_2^2$  sont  $\widehat{J}_{1,z}$  et  $\widehat{J}_{2,z}$  et il est possible de prendre leur somme et leur différence pour obtenir  $\widehat{L}_z$  et  $\widehat{A}_z$  qui seront donc entiers. En revanche il n'est pas possible de reconstituer  $\widehat{L}^2$  ni  $\widehat{A}^2$ .

b) Voir figure E.1.

c) De façon qualitative, le vecteur  $\vec{L}$  est le plus grand possible lorsque  $\vec{J}_1$  et  $\vec{J}_2$  sont parallèles et maximaux. Donc la valeur maximale de  $\widehat{L}_z$  est réalisée dans l'état où  $\vec{u}_1 = \vec{u}_2 = \vec{u}_z$  et  $m_1 = m_2 = j = \pm(n-1)/2$ . On en déduit que les valeurs extrémales de  $m$  sont  $\pm(n-1)$ . En conséquence, la valeur maximale de  $\ell$  autorisée est  $\ell = n-1$ , correspondant à  $\widehat{L}^2 = n(n-1)\hbar^2$ .

d) Les états « circulaires » sont ceux qui, pour une énergie donnée, ont un moment cinétique maximal c'est à dire ceux que nous avons mis en évidence à la question précédente, avec  $m = n-1$  et  $k = 0$ . Il sont représentés par un  $\otimes$  sur figure E.1. Notons que nous obtenons ici des valeurs maximale de  $\ell$  et de  $|m|$  de  $n-1$  et non  $n$ ; cela vient du  $\frac{1}{2}$  dans (E.21), c'est à dire du  $\hbar^2$  dans (E.13), donc des fluctuations quantiques non prises en compte dans le modèle semi-classique.

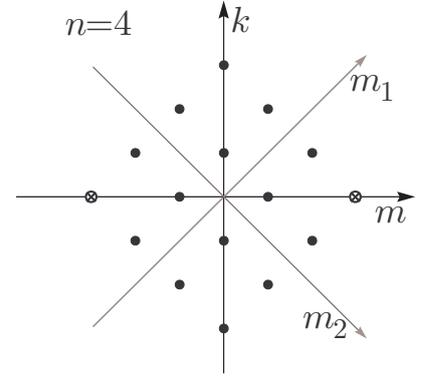


Fig. E.1 – Diagramme des 16 états du niveau  $n = 4$  dans le cas où les axes de quantification de  $\widehat{J}_1$  et  $\widehat{J}_2$  sont identiques.

## E.II États de fluctuations minimales d'un moment cinétique

1 a) On a par construction  $\langle \widehat{J}_z \rangle = \langle j, m | \widehat{J}_z | j, m \rangle = m\hbar$ .

Avec les relations de commutation, on peut écrire :

$$[\widehat{J}_z, \widehat{J}_x] = i\hbar \widehat{J}_y \Rightarrow \langle j, m | [\widehat{J}_z, \widehat{J}_x] | j, m \rangle = \langle j, m | m\hbar \widehat{J}_x | j, m \rangle - \langle j, m | \widehat{J}_x m\hbar | j, m \rangle = 0 = i\hbar \langle j, m | \widehat{J}_y | j, m \rangle,$$

et de même en échangeant  $x$  et  $y$ . Il en résulte :  $\langle \widehat{J} \rangle = m\hbar \vec{u}_z$ .

b) Pour l'état  $|j, m\rangle$ , on a simplement :  $\Delta \widehat{J}^2 = \langle \widehat{J}^2 \rangle - \langle \widehat{J} \rangle^2 = j(j+1)\hbar^2 - (m\hbar \vec{u}_z)^2$ .  $\square$

Pour minimiser cette quantité, il faut maximiser  $m^2$ . On vérifie que le choix  $m = \pm j$  donne  $\Delta \widehat{J}^2 = (j(j+1) - j^2)\hbar^2 = j\hbar^2$ , qui réalise donc le minimum.

2 a) Il suffit de changer d'axes pour amener l'axe  $z$  dans la direction de  $\vec{u}$ . Techniquement, la matrice de rotation, de la forme  $\exp[-i\vec{J} \cdot \vec{v}/\hbar]$  (où  $\vec{v}$  définit la direction de l'axe de rotation et  $\|\vec{v}\|$  l'angle de rotation), modifie de façon cohérente les états et les opérateurs en sorte que les valeurs moyennes ne sont pas modifiées. On obtient donc  $\langle \hat{J} \rangle = j\hbar \vec{u}$  et  $\Delta \hat{J}^2 = j\hbar^2$ .

b) On peut représenter l'opérateur  $\hat{J}$  sous la forme  $\hat{J} = \langle \hat{J} \rangle + \delta \hat{J}$ , où le second terme représente les fluctuations, ce qui impose :

$$\langle \delta \hat{J} \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle (\delta \hat{J})^2 \rangle = \Delta \hat{J}^2 .$$

Si on écrit la valeur moyenne de  $\hat{J}^2$  on obtient alors :

$$\langle \hat{J}^2 \rangle = \langle \hat{J} \rangle^2 + \Delta \hat{J}^2$$

et il est naturel d'interpréter cette expression en voyant dans le second terme la composante transverse, que l'on peut écrire  $\langle \hat{J}^2 \sin^2 \beta \rangle$ , ce qui définit l'angle  $\beta$ . On a bien sûr  $\langle \hat{J}^2 \sin^2 \beta \rangle = \hat{J}^2 \langle \sin^2 \beta \rangle$ , puisque l'état considéré est vecteur propre de  $\hat{J}^2$ . Comme  $\langle \sin \beta \rangle \propto \langle \delta \hat{J} \rangle = 0$ , on peut en déduire :

$$(\Delta \beta)^2 \approx \langle \sin^2 \beta \rangle = \Delta \hat{J}^2 / \langle \hat{J}^2 \rangle = 1/(j+1) \quad (\text{E.22})$$

On en déduit  $\Delta \beta \sim j^{-1/2}$  pour  $j \rightarrow \infty$  : la délocalisation due aux fluctuations quantiques à une influence d'autant plus faible que le nombre quantique  $j$  est grand.

### E.III États quasi-classiques de l'atome d'hydrogène (*J.C Gay et al, 1988-89*)

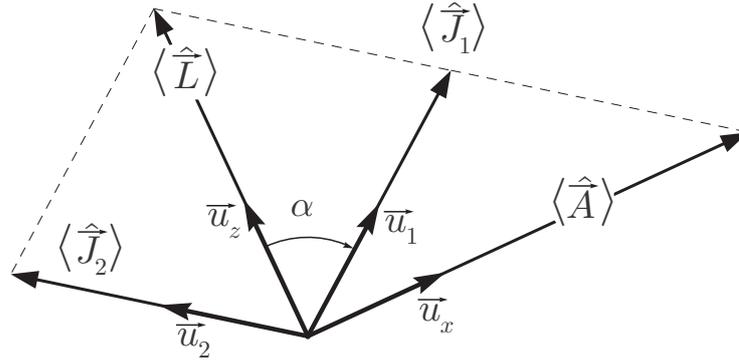


Fig. E.2 – Disposition relative, dans le plan défini par  $\vec{u}_1$  et  $\vec{u}_2$  des différents vecteurs considérés.

1 On a par construction  $\langle \hat{J}_1 \rangle = j\hbar \vec{u}_1$  et  $\langle \hat{J}_2 \rangle = j\hbar \vec{u}_2$ , ainsi que  $\Delta \hat{J}_1^2 = \Delta \hat{J}_2^2 = j\hbar^2$ . En outre,  $\hat{J}_1$  et  $\hat{J}_2$  étant indépendants, leurs fluctuations ne sont pas couplées, et

$$\langle \hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2 \rangle = \langle j, m_1, m_2 | \hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2 | j, m_1, m_2 \rangle = \langle j, m_1 | \hat{J}_1 | j, m_1 \rangle \cdot \langle j, m_2 | \hat{J}_2 | j, m_2 \rangle = \langle \hat{J}_1 \rangle \langle \hat{J}_2 \rangle . \quad (\text{E.23})$$

a) On a immédiatement (avec  $2j = n - 1$ ) :

$$\langle \hat{L} \rangle = \langle \hat{J}_1 \rangle + \langle \hat{J}_2 \rangle = (n-1)\hbar \cos \alpha \vec{u}_z \quad (\text{E.24})$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{J}_1 \rangle - \langle \hat{J}_2 \rangle = (n-1)\hbar \sin \alpha \vec{u}_x \quad (\text{E.25})$$

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \|\langle \hat{A} \rangle\|/I \approx \sin \alpha \quad (\text{E.26})$$

b) On peut calculer  $\Delta \hat{L}^2$  et  $\Delta \hat{A}^2$  à partir des variances de  $\hat{J}_1$  et  $\hat{J}_2$  et en utilisant l'équation (E.23) :

$$\begin{aligned} \Delta \hat{L}^2 &= \langle (\hat{J}_1 - \langle \hat{J}_1 \rangle + \hat{J}_2 - \langle \hat{J}_2 \rangle)^2 \rangle \\ &= \Delta \hat{J}_1^2 + \Delta \hat{J}_2^2 + 2 \underbrace{\langle \hat{J}_1 - \langle \hat{J}_1 \rangle \rangle}_0 \cdot \underbrace{\langle \hat{J}_2 - \langle \hat{J}_2 \rangle \rangle}_0 = (n-1)\hbar^2 \end{aligned} \quad (\text{E.27})$$

$$\text{et de même} \quad \Delta \hat{A}^2 = (n-1)\hbar^2 \quad (\text{E.28})$$

c) Dans la même approche qu'au § ??, les fluctuations des angles  $\gamma$  et  $\delta$  sont données par :

$$\Delta\gamma^2 = \frac{\Delta\widehat{L}^2}{\langle\widehat{L}^2\rangle} = \frac{2j\hbar^2}{4j^2\hbar^2\cos^2\alpha + 2j\hbar^2} \approx \frac{1}{(n-1)\cos^2\alpha + 1},$$

$$\Delta\delta^2 = \frac{\Delta\widehat{A}^2}{\langle\widehat{A}^2\rangle} = \frac{2j\hbar^2}{4j^2\hbar^2\sin^2\alpha + 2j\hbar^2} \approx \frac{1}{(n-1)\sin^2\alpha + 1}.$$

Soit pour  $\alpha \neq 0, \pi/2$ ,  $\Delta\gamma \approx (\sqrt{2j}\cos\alpha)^{-1}$  et  $\Delta\delta \approx (\sqrt{2j}\sin\alpha)^{-1}$ .

d) Le plan contenant  $\vec{r}$  et  $\vec{p}$  est le plan normal à  $\vec{L}$ , qui est de mieux en mieux défini autour du plan  $xy$  lorsque  $n \rightarrow \infty$ . A  $n$  donné, il est d'autant mieux défini que  $\cos^2\alpha$  est grand, c'est à dire que  $\alpha$  est proche de zéro.

e) La direction du grand axe, repérée par  $\delta$  est de mieux en mieux alignée avec l'axe  $x$  lorsque  $n \rightarrow \infty$ . A  $n$  donné, il d'autant mieux défini que  $\sin^2\alpha$  est grand, c'est à dire que  $\alpha$  est proche de  $\pi/2$ .

2 *Cas limite  $\alpha = 0$*  : On retrouve la situation du § E.I.5.

a) Les fluctuations de la direction de  $\vec{L}$  sont en  $1/j$ , le plan de la trajectoire est quasiment confondu avec le plan  $xy$ , donc la probabilité de présence de l'électron sera fortement concentrée au voisinage de ce plan. De plus  $\langle L \rangle$  prend sa valeur maximale pour l'énergie considérée.

b) On a aussi  $\langle \widehat{A} \rangle = 0$  et  $\langle \mathcal{A} \rangle = 0$  avec de faibles fluctuations : l'électron ne doit pas s'éloigner beaucoup de la trajectoire circulaire de Bohr. D'où son nom d'état circulaire.

3 *Cas limite  $\alpha = \pi/2$*

a) Le moment cinétique est de valeur moyenne nulle et sa direction fluctue fortement : le « plan de la trajectoire » n'est pas défini.

b) A l'opposé, le vecteur  $\vec{A}$  et le grand axe de l'ellipse sont très bien défini, et de valeur maximale : on est très proche de la situation de l'ellipse dégénérée sur un segment de droite. On s'attend à ce que l'électron soit localisé au voisinage de ce segment, ce qui donne à la distribution de probabilité de présence la forme d'un cigare (dont l'épaisseur est due aux fluctuations de l'angle  $\delta$ ).

4 *Localisation*

a) D'après la question B.I.4, on voit qu'en mécanique classique  $\mathcal{C}_{cl} = \vec{L}^2$ . En mécanique quantique, en utilisant l'égalité (E.14), on voit que l'opérateur  $\widehat{\mathcal{C}}$  est égal à  $\widehat{L}^2 + \frac{3}{2}\hbar^2$ . Sa valeur moyenne s'en déduit simplement :

$$\langle \widehat{\mathcal{C}} \rangle = \langle \widehat{L}^2 \rangle + \frac{3}{2}\hbar^2 = 2\hbar^2(j(j+1) + j^2\sin(2\alpha)) + \frac{3}{2}\hbar^2.$$

Ceci suggère que l'électron est localisé au voisinage de la trajectoire classique. Toutefois en mécanique quantique, ni l'égalité entre opérateur ni l'égalité entre valeurs moyennes ne permettent de conclure sur la localisation. Il faut aussi évaluer les fluctuations de  $\widehat{\mathcal{C}}$ .

b) En écrivant  $\widehat{L}^2 = (\widehat{J}_1 + \widehat{J}_2)^2$  on peut évaluer :

$$\Delta\widehat{\mathcal{C}}^2 = (\Delta\widehat{L}^2)^2 = \langle (\widehat{J}_1^2 + \widehat{J}_2^2 + 2\widehat{J}_1 \cdot \widehat{J}_2)^2 \rangle - \langle (\widehat{J}_1^2 + \widehat{J}_2^2 + 2\widehat{J}_1 \cdot \widehat{J}_2) \rangle^2.$$

Dans cette expression, les termes en  $\langle \widehat{J}_1^4 \rangle$  et en  $\langle \widehat{J}_2^4 \rangle$  ou en  $\langle \widehat{J}_1^2 \widehat{J}_2^2 \rangle$  disparaissent puisque qu'on considère un état propre de  $\widehat{J}_1^2$  et de  $\widehat{J}_2^2$ , qui sont donc parfaitement déterminés. Pour la même raison,  $\langle \widehat{J}_1^2 (\widehat{J}_1 \cdot \widehat{J}_2) \rangle = \langle \widehat{J}_1^2 \rangle \langle (\widehat{J}_1 \cdot \widehat{J}_2) \rangle$  et les termes correspondant disparaissent aussi. Il ne reste alors plus que les termes où le produit scalaire apparaît deux fois, car si  $\langle \widehat{J}_1 \cdot \widehat{J}_2 \rangle = \langle \widehat{J}_1 \rangle \cdot \langle \widehat{J}_2 \rangle$  par indépendance des deux générateurs, on ne peut pas simplifier directement :

$$\langle (\widehat{J}_1 \cdot \widehat{J}_2)^2 \rangle - \langle \widehat{J}_1 \cdot \widehat{J}_2 \rangle^2 = \sum_{ij} \langle \widehat{J}_{1,i} \widehat{J}_{1,j} \rangle \langle \widehat{J}_{2,i} \widehat{J}_{2,j} \rangle - \sum_{ij} \langle \widehat{J}_{1,i} \rangle \langle \widehat{J}_{2,j} \rangle$$

en raison des corrélations entre les composantes de chacun des deux générateurs.

c) Le résultat admis indique que  $\Delta\mathcal{C}$  est d'ordre  $j^{3/2}$  au plus, alors que  $\langle \widehat{\mathcal{C}} \rangle$  est d'ordre  $j^2$ , ce qui montre que pour  $j$  grand, la valeur de  $\widehat{\mathcal{C}}$  fluctue peu et la densité de présence de l'électron est essentiellement localisée au voisinage de l'ellipse définie par  $mK(\vec{r} - \langle \widehat{A} \rangle) \cdot \vec{r} = \langle \widehat{L}^2 \rangle + \frac{3}{4}\hbar^2$ . On peut noter que cette localisation est un peu meilleure dans le cas où  $\alpha = \pi/2$  (état cigare), et encore meilleure pour  $\alpha = 0$  (état circulaire) qui réalise  $\Delta\mathcal{C} = 0$  puisque c'est un état propre de  $\widehat{L}^2$ .

- 5 *Atome en champs croisés* On a :  $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{W} = \widehat{H}_0 + \vec{\Omega}_F \cdot \widehat{A} + \vec{\Omega}_B \cdot \widehat{L}$ .  
a) Le terme de perturbation dû au champ s'exprime encore :

$$\widehat{W} = \vec{\Omega}_1 \cdot \widehat{J}_1 + \vec{\Omega}_2 \cdot \widehat{J}_2 \quad \text{où} \quad \vec{\Omega}_{1,2} = \vec{\Omega}_B \pm \vec{\Omega}_F. \quad (\text{E.29})$$

Les directions respectives des deux vecteurs  $\vec{\Omega}_{1,2}$  définissent les vecteurs unitaires  $\vec{u}_1$  et  $\vec{u}_2$  des question E.III1 à E.II.4 ci dessus. Les états *stationnaires* d'énergie extrémale sont donc ceux où  $\widehat{J}_1$  pointe dans le sens de  $\vec{u}_1$  et de même pour 2 (énergie maximale), et celui où  $\widehat{J}_1$  pointe dans la direction *opposée* à  $\vec{u}_1$  et de même pour 2 (énergie minimale), soit les états  $|j, j\rangle_{\vec{u}_1} \otimes |j, j\rangle_{\vec{u}_2}$  et  $|j, -j\rangle_{\vec{u}_1} \otimes |j, -j\rangle_{\vec{u}_2}$ .

Compte tenu des question précédentes, ces états stationnaires vérifient  $\langle \widehat{L} \rangle = \pm 2j \cos \alpha \hbar \vec{u}_z$  et  $\langle \widehat{A} \rangle = \pm 2j \sin \alpha \hbar \vec{u}_x$ , c'est à dire que ces valeurs moyennes sont colinéaires aux champs auxquels ils sont couplés, ce qui rend l'énergie d'interaction extrémale. Comme on suppose  $\vec{\Omega}_B \cdot \vec{\Omega}_F = 0$ , les deux vecteurs  $\vec{\Omega}_{1,2}$  ont la même norme  $\Omega = (\vec{\Omega}_B^2 + \vec{\Omega}_F^2)^{1/2}$ , et cette énergie s'écrit  $\Delta E = \pm 2j \hbar \Omega$ . L'angle  $\alpha$  est ici le demi-angle qui sépare les vecteurs  $\vec{\Omega}_1$  et  $\vec{\Omega}_2$ , soit  $\sin \alpha = \Omega_F / \Omega$  et  $\cos \alpha = \Omega_B / \Omega$ , ou encore :

$$\tan \alpha = \frac{A_x}{L_z} = \frac{\Omega_F}{\Omega_B} = \frac{3I F}{K B} = \frac{3n F}{\alpha c B}. \quad (\text{E.30})$$

- 6 *Excitation des états quasi-classiques* (D. Delande and J. C. Gay et J. Hare, M. Gross and P. Goy (1989))

- a) En champ électrique seul,  $\alpha = \pm \pi/2$ , donc  $\langle \widehat{L} \rangle = 0$  : ce sont les états cigares tels que  $\langle \widehat{A} \rangle = \pm (n-1) \hbar \vec{u}_x$   
b) En champ magnétique seul,  $\alpha = 0$ , donc  $\langle \widehat{A} \rangle = 0$  : ce sont les états circulaires tels que  $\langle \widehat{L} \rangle = \pm (n-1) \hbar \vec{u}_z$ .  
7 On a la règle de sélection :  $\|\Delta \ell\| \leq 1$  et  $\|\Delta m\| \leq 1$ .  
a) L'état fondamental  $n = 1$  possède un moment cinétique (orbital) nul. Un état circulaire de  $n > 2$  possède un moment cinétique  $\ell = \|m\| = (n-1) > 1$  et ne peut donc pas être atteint par une excitation à un photon respectant les règles de sélection.  
b) L'état cigare est pour sa part un état de moment cinétique  $m = 0$  qui n'est pas vecteur propre de  $\widehat{L}^2$  mais au contraire une combinaison linéaire de kets ayant toutes les valeurs de  $\ell = 0$  à  $\ell = n-1$ . Il est donc fort probable qu'il ait un élément de matrice de transition non nul avec l'état fondamental.  
c) L'évolution adiabatique des états quasi-classiques dans des champs électrique et magnétique lentement variables (en module ou en direction) se déduit simplement de ce qui a été établi à la question précédente : les directions de  $\langle \widehat{J} \rangle_{1,2}$  suivent celles des vecteurs  $\vec{\Omega}_{1,2}$  mais conservent leur norme, ce qui fait qu'un état quasi-classique se transforme en un autre état quasi-classique. Le rapport  $A/L$  reste fixé par les modules et directions des deux champs.  
d) Il suffit de se placer en champs électrique et magnétique croisés, dans un régime où  $\Omega_F \gg \omega_B$  : les états quasi-classiques sont très proches de l'état cigare et peuvent être excités par une transition à un photon, en sélectionnant l'état de plus haute ou de plus basse énergie dan la multiplicité de  $n$  donné. En faisant décroître lentement le champ électrique jusqu'à ce que  $\Omega_F \ll \omega_B$ , l'angle  $\alpha$  varie continûment  $\pm \pi/2$  à 0, et l'état cigare initial évolue vers l'état circulaire en passant par tous les états elliptique d'excentricité décroissante. Et cela fonctionne expérimentalement !