

CONTRÔLE HORS CLASSEMENT DU COURS DE PHYSIQUE PHY 432

Mardi 29 avril 2003, durée : 2 heures

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

Cet examen comporte un problème de mécanique quantique (coefficient 3) et un exercice de physique statistique (coefficient 1). Les deux parties du problème et l'exercice sont indépendants.

Problème : l'atome d'hélium et les molécules He₂, He₃

1 L'état fondamental de l'atome d'hélium

1. On considère un atome à un électron, de masse m_e et de charge $-q$ ($q > 0$). La charge du noyau est Zq , avec Z entier. On pose $e^2 = q^2/(4\pi\epsilon_0)$.
 - (a) En suivant la notation du cours, on désigne par $\psi_{n,\ell,m}(\vec{r})$ la partie orbitale des états de l'électron d'énergie négative (état liés). Indiquer les observables associées aux deux nombres quantiques ℓ et m et les valeurs possibles de ces nombres.
 - (b) Donner en fonction de Z et du rayon de Bohr $a_1 = \hbar^2/(m_e e^2)$ l'expression de la partie orbitale $\psi_{1,0,0}(\vec{r})$ de l'état fondamental de l'atome.
 - (c) Rappeler sans démonstration comment varient avec Z l'énergie et la taille « caractéristique » de cet état fondamental.
2. L'atome d'hélium est formé par un noyau de charge $Z = 2$ et deux électrons. Dans cette question, on prend seulement en compte l'interaction coulombienne entre le noyau et chaque électron. On néglige en particulier la répulsion électrostatique entre les deux électrons. Le noyau est supposé infiniment lourd et immobile en $\vec{r} = 0$.
 - (a) Écrire l'hamiltonien \hat{H} des deux électrons. Mettre \hat{H} sous la forme $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, où \hat{H}_i ($i = 1, 2$) fait intervenir les opérateurs position \hat{r}_i et impulsion \hat{p}_i de l'électron i .
 - (b) Quelle est l'énergie E_f du niveau fondamental de \hat{H} dans cette approximation d'électrons indépendants? En prenant en compte le principe de Pauli, donner la dégénérescence de ce niveau et l'expression du (ou des) état(s) propre(s) (orbital+spin).
 - (c) On rappelle que $m_e e^4/(2\hbar^2) = 13,6$ eV. En déduire la valeur numérique de E_f .
3. On prend en compte l'interaction coulombienne entre les deux électrons : $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$. Calculer l'effet de \hat{V} sur le niveau fondamental de \hat{H} au premier ordre de la théorie des perturbations. On donne l'intégrale :

$$\iint \frac{e^{-2(\rho_1 + \rho_2)}}{|\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2|} d^3\rho_1 d^3\rho_2 = \frac{5\pi^2}{8} .$$

Donner en électron-volts la valeur de l'énergie du niveau fondamental à cet ordre du calcul.

4. En plus de sa charge $-q$, chaque électron possède un moment magnétique $-q\hbar/(2m_e)$.
 - (a) Estimer la valeur de l'énergie d'interaction magnétique entre ces deux moments magnétiques. On ne cherchera pas à calculer les moyennes spatiales susceptibles d'apparaître et on se contentera de donner un ordre de grandeur de l'effet.

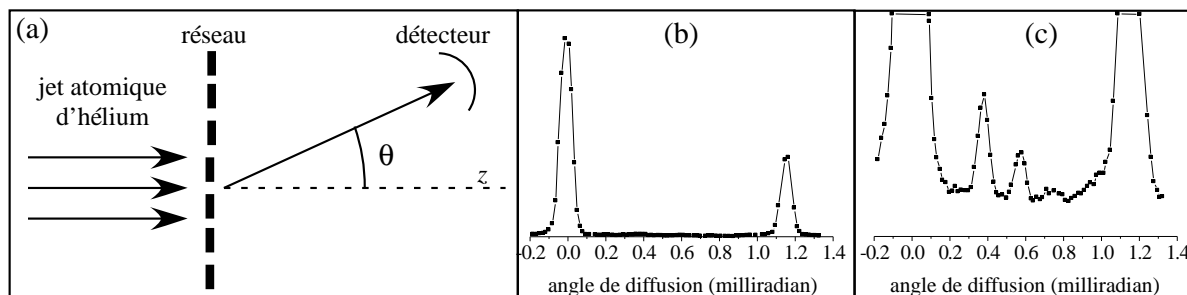


FIG. 1 – (a) Diffraction d'un jet d'hélium par un réseau. (b) Signal détecté en fonction de l'angle θ de déflexion. (c) Mêmes données qu'en (b), avec une échelle verticale multipliée par 60.

(b) Comparer l'énergie d'interaction magnétique entre électrons au terme d'interaction coulombienne. On utilisera $\epsilon_0\mu_0c^2 = 1$ et on exprimera le rapport entre ces deux termes en fonction de la constante de structure fine $\alpha = e^2/(\hbar c)$. Les effets magnétiques sont-ils importants ?

5. La mesure expérimentale de l'énergie du niveau fondamental de l'atome d'hélium donne $E_f = -79$ eV. Comment ceci se compare-t-il aux prédictions du modèle précédent ? Comment pourrait-on améliorer la précision du calcul ?

2 Les molécules d'hélium He_2 et He_3

L'existence de ces molécules est longtemps restée controversée et indécisée. Leur existence a été prouvée par une expérience récente menée à Göttingen¹. On étudie pour cela la diffraction d'un jet froid et monocinétique d'hélium monoatomique, dans lequel quelques molécules He_2 et He_3 sont présentes. La masse d'un atome d'hélium est $M = 6,69 \times 10^{-27}$ kg.

1. Donner la longueur d'onde λ_1 associée à un jet d'atomes d'hélium de vitesse $v = 430$ m/s. Quelles sont les longueurs d'onde λ_2 et λ_3 associées aux molécules He_2 et He_3 présentes dans le jet, en admettant qu'elles se propagent à la même vitesse ?
2. On envoie le jet atomique en incidence normale sur un réseau de fentes régulièrement espacées (figure 1a). La distance entre deux fentes consécutives est $d = 200$ nm.
 - (a) Expliquer brièvement pourquoi une diffraction cohérente (diffraction de Bragg) peut se produire dans certaines directions.
 - (b) Calculer pour le jet d'atomes d'hélium l'angle θ entre la première direction diffractée et l'axe z . On exprimera θ en fonction de λ_1 et d , en utilisant le fait que $\lambda_1 \ll d$.
3. La distribution angulaire mesurée expérimentalement est tracée sur la figure 1b. Le pic mesuré en $\theta = 0$ correspond au jet non diffracté par le réseau. La position du pic diffracté est-elle en accord avec la prédiction de la question précédente ?
4. La figure 1c montre un agrandissement de la figure 1b. L'échelle verticale a été dilatée pour mettre en évidence certains détails. Expliquer pourquoi cette figure permet de conclure à l'existence des molécules He_2 et He_3 .
5. Dans une expérience complémentaire², on a déterminé la distance $D = 5,2$ nm entre les deux atomes d'hélium composant la molécule He_2 . L'hamiltonien décrivant la rotation de cette molécule s'écrit $\hat{H} = \hat{L}^2/(2I)$ où \hat{L} est l'opérateur moment cinétique orbital relatif

¹W. Schöllkopf and J.P. Toennies, Science **266**, 1345 (1994).

²R. Grissenti *et al.*, Phys. Rev. Lett. **85**, 2284 (2000).

entre les deux atomes, et $I = MD^2/2$ le moment d'inertie.

- (a) Quelles sont les énergies attendues pour les trois premiers niveaux de rotation de la molécule ?
- (b) L'énergie de liaison E_0 de la molécule He_2 dans son état fondamental est extrêmement faible : $|E_0| \simeq 10^{-7}$ eV. Dans quel(s) état(s) de rotation peut-on espérer trouver la molécule ?

Corrigé du problème

1 L'état fondamental de l'atome d'hélium

1. (a) Le nombre quantique ℓ est associé à l'observable \hat{L}^2 , où $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ est l'opérateur moment cinétique orbital de l'électron. Les résultats possible d'une mesure de \hat{L}^2 sont $\hbar^2 \ell(\ell+1)$ avec ℓ entier positif ou nul. Le nombre quantique m est associée à \hat{L}_z . Les résultats possibles d'une mesure de \hat{L}_z (ℓ étant fixé) sont $m\hbar$, où m est entier compris entre $-\ell$ et $+\ell$.

- (b) La partie orbitale de l'état fondamental s'écrit $\psi_{1,0,0}(\vec{r}) = Ce^{-Zr/a_1}$ avec $C = \frac{\sqrt{Z^3}}{\sqrt{\pi a_1^3}}$.
C'est un état de moment cinétique nul, à symétrie sphérique.

- (c) Cet état a une énergie $-Z^2 E_I$ avec $E_I = m_e e^4 / (2\hbar^2)$ et une taille $\sim a_1/Z$.

2. (a) Dans cette approximation d'électrons indépendants, l'hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \quad \text{avec} \quad \hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{\hat{r}_i} .$$

- (b) On obtient le niveau fondamental de l'atome en mettant chaque électron dans l'état orbital $\psi_{1,0,0}(\vec{r}_i)$ correspondant à l'état fondamental de \hat{H}_i . Chaque électron a l'énergie $-2m_e e^4 / \hbar^2$, soit une énergie totale :

$$E_f = -4m_e e^4 / \hbar^2 .$$

Pour satisfaire au principe de Pauli, il faut que le vecteur d'état des deux électrons soit antisymétrique par échange des deux électrons. La partie orbitale étant symétrique, il faut que les deux spins soient dans l'état singulet :

$$|\Psi_f\rangle = |1 : \psi_{1,0,0} ; 2 : \psi_{1,0,0}\rangle \otimes \frac{|1 : + ; 2 : -\rangle - |1 : - ; 2 : +\rangle}{\sqrt{2}} .$$

Le niveau fondamental n'est donc pas dégénéré.

- (c) On trouve $E_f = 8 \times (-13,6) = -108,8$ eV.

3. Il faut appliquer la théorie des perturbations au premier ordre dans le cas non dégénéré. Le déplacement du niveau fondamental dû à la perturbation V s'écrit :

$$\Delta E = \langle \Psi_f | \hat{V} | \Psi_f \rangle = \iint |\psi_{1,0,0}(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{1,0,0}(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d^3 r_1 d^3 r_2 .$$

On pose $\vec{\rho}_i = 2\vec{r}_i/a_1$ et on trouve :

$$\Delta E = \frac{5}{4} \frac{e^2}{a_1} = 34,0 \text{ eV} .$$

A cet ordre du calcul, l'énergie de l'état fondamental est donc : $E_f = -108,8 + 34,0 = -74,8$ eV.

4. (a) L'ordre de grandeur de l'énergie d'interaction de deux dipôles magnétiques μ séparés par une distance d est $W \sim \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mu^2}{d^3}$. La distance entre les deux électrons est de l'ordre du rayon de Bohr a_1 . On a donc :

$$|W| \sim \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q^2 \hbar^2}{4m_e^2 a_1^3} .$$

- (b) En remplaçant a_1 par sa valeur, on trouve $|W| \sim \alpha^2 e^2 / a_1$. La correction d'énergie liée à l'interaction magnétique entre électrons est donc 10^4 fois plus faible que l'énergie d'interaction électrostatique. On peut la négliger à cet ordre du calcul.
5. La mesure expérimentale (-79 eV) donne un résultat remarquablement proche de la prédiction de ce modèle très simple ($-74,8$ eV). Pour aller au delà, on peut chercher à calculer les ordres suivants de la théorie des perturbations. On peut aussi utiliser des méthodes plus sophistiquées, consistant à évaluer pour chaque électron, le champ moyen créé par le noyau et l'autre électron (cf. Chap. 16, § 4.6).

2 Les molécules d'hélium He_2 et He_3

1. La relation de de Broglie $\lambda = h/(Mv)$ donne $\lambda_1 = 2,30 \times 10^{-10}$ m. Pour des particules de masse double ou triple se propageant à la même vitesse, on trouve $\lambda_2 = 1,15 \times 10^{-10}$ m et $\lambda_3 = 0,77 \times 10^{-10}$ m.
2. (a) Pour avoir interférence constructive dans une direction θ , il faut que la différence de marche $d \sin \theta$ entre les chemins passant par deux fentes voisines soit un multiple de la longueur d'onde λ . Les angles caractérisant une diffraction cohérente sont donc donnés par $\sin \theta = n\lambda/d$.
- (b) Le premier ordre de diffraction est donné par $\theta \simeq \lambda/d = 1,15$ milliradian.
3. Le pic diffracté correspond à un angle de déflexion $\theta = 1,16$ milliradian, en bon accord avec la prédiction ci-dessus.
4. Dans l'image agrandie, on voit apparaître des pics à $\theta = 0,58$ mrad et $\theta = 0,40$ mrad, soit la moitié et le tiers de l'angle précédent. Si on suppose que tous les composants du jet vont à la même vitesse (ce qu'on peut vérifier par temps de vol), ceci signifie que les objets créant ces pics ont une masse double ou triple de la masse atomique. Il s'agit des molécules He_2 et He_3 .
5. (a) Puisqu'il s'agit d'un moment cinétique orbital, les valeurs propres possible de l'opérateur \hat{L}^2 sont $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ avec $\ell = 0, 1, 2, \dots$. Les trois premiers niveaux de rotation de la molécule ont donc l'énergie :

$$\ell = 0 : E_{\text{rot}}^{(0)} = 0 \quad ; \quad \ell = 1 : E_{\text{rot}}^{(1)} = \frac{2\hbar^2}{MD^2} \quad ; \quad \ell = 2 : E_{\text{rot}}^{(2)} = \frac{6\hbar^2}{MD^2} .$$

- (b) Pour le premier niveau de rotation excité, on trouve que $E_{\text{rot}}^{(1)} = 2\hbar^2/(MD^2) \simeq 8 \times 10^{-7}$ eV. Cette énergie est supérieure à l'énergie de liaison de la molécule. Par conséquent, la molécule n'est pas stable dans cet état de rotation (ni bien sûr dans des états correspondant à des ℓ plus grands). En termes classiques, dès que ℓ est non nul, la force centrifuge est suffisante pour rompre la faible liaison entre les deux atomes d'hélium. Cette molécule He_2 ne peut donc exciter que dans l'état de moment cinétique nul $\ell = 0$.

Remarque : ce raisonnement mériterait d'être approfondi. En effet, un état de moment cinétique non nul pourrait correspondre à une distance d'équilibre D plus grande que celle mesurée pour $\ell = 0$, et donc une énergie de rotation plus basse. Toutefois, l'énergie de liaison $|E_0|$ diminuerait également si on augmentait D , et on peut montrer rigoureusement qu'il n'existe pas de solution stable pour $\ell \neq 0$.